

Simulação Monte Carlo de mecanismo de transferência de energia de excitação eletrônica: Modelo de Perrin.

Lauro Camargo Dias Júnior (PQ), João Batista Marques Novo* (PQ, jbm Novo@quimica.ufpr.br).

Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná, CP 19081, 81531-990, Curitiba – PR, Brasil.

Palavras Chave: Simulação Monte Carlo, Modelo de Perrin.

Introdução

O entendimento de mecanismos de transferência de energia pode ser difícil e trabalhoso, pois as equações matemáticas associadas são bastante complexas. Sendo assim, o Método de Monte Carlo (MC) é muito útil, pois permite que se simule sistemas complexos de modo muito simples, sem que seja necessário saber, a priori, a equação cinética associada. Existem vários modelos de transferência de energia de estados eletrônicos excitados, sendo que o de Perrin¹ envolve transferência de energia de excitação à longa distância e se aplica a sólidos, ou seja, as moléculas doadoras e supressoras são estáticas.

O objetivo deste trabalho é apresentar simulações de comportamentos cinéticos para a supressão de energia entre moléculas doadoras excitadas e moléculas supressoras, de acordo com o modelo de Perrin.

Resultados e Discussão

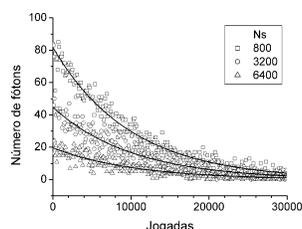
O software "Perrin", desenvolvido para as simulações, foi escrito em linguagem BASIC para o compilador FreeBASIC² e possui as seguintes características: a entrada de dados consiste no dimensionamento: a) da aresta de um "universo cúbico", b) do número de moléculas doadoras (Nd) e supressoras (Ns), c) do raio da esfera de supressão (R) das moléculas doadoras e d) do número de jogadas (sorteios) do método MC. O programa principal consiste em: (1) sortear as posições (coordenadas) das moléculas doadoras e supressoras no universo; (2) Sortear uma molécula doadora; Se ela existir no estado excitado, (3) calcula-se as distâncias até as moléculas supressoras; (4) se a distância doadora - supressora for menor que R, a molécula doadora tem a luminescência suprimida (não emite fóton); (5) se todas as distâncias forem maiores que R, a molécula doadora emite fóton; (6) conta-se o número de fótons (N) emitidos a cada 100 sorteios; (7) o gráfico número de fótons emitidos em função do número de jogadas é mostrado na tela; (8) o gráfico de Perrin, $\ln(N_0/N)$ em função da concentração das moléculas supressoras é mostrado na tela.

As simulações foram realizadas com aresta do universo=100, Nd=10000, Ns= 100, 200, 400, 33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

800, 1600, 3200 e 6400, R=3, 3,5, 4, 4,5 e número de jogadas=30000.

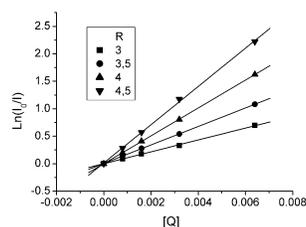
Os gráficos de números de fótons emitidos em função do número de jogadas (Fig. 1) apresentaram decaimento exponencial, com a amplitude diminuindo à medida que se aumenta o número de moléculas supressoras. Observou-se, entretanto, que todos os gráficos apresentaram a mesma inclinação, que é característica do tempo de vida das moléculas doadoras.

Figura 1. Número de fótons emitidos em função do número de jogadas.



Os gráficos de Perrin, $\ln(N_0/N)$ em função da concentração de moléculas supressoras (Fig. 2), apresentaram-se lineares, com coeficiente angular dependente de R ao cubo.

Figura 2. Gráficos de Perrin.



Conclusões

Os dados obtidos pelo software desenvolvido foram muito bons e estão de acordo com o esperado pelo modelo de supressão de energia de Perrin.

¹ Turro, N. J., *Modern Molecular Photochemistry*, University Science Books, Sausalito, USA, 1991, Cap. 9. 9, p.317.

² Victor, A.; *FreeBASIC Compiler*, Free, open source BASIC Compiler; <http://sourceforge.net/projects/fbc/>. Debord, J.; *FBMath*; *FreeBASIC Math library*; <http://sourceforge.net/projects/fbmath/>.