

Utilização do método AM1 para o estudo de moléculas fotocromicas.

Flávia M. Kanashiro (IC), Paula Homem-de-Mello (PQ)*

ABCSim, Universidade Federal do ABC, Santo André/SP.
Palavras Chave: AM1, corantes, fotocromismo

*paula.mello@ufabc.edu.br

Introdução

Muitas moléculas podem sofrer um processo que induz uma mudança reversível nas cores dos compostos, chamada de cromismo. Este pode ser classificado pelo tipo de estímulo que causa a mudança de cor. Os principais tipos são: fotocromismo, termocromismo, eletrocromismo e solvatocromismo¹. Fotocromismo é a transformação reversível entre duas espécies com espectros de absorção diferentes promovida, pelo menos em uma direção, por radiação eletromagnética².

Neste trabalho foi verificada a aplicabilidade dos métodos semi-empíricos AM1 no estudo do fotocromismo de alguns corantes.

Resultados e Discussão

Foram escolhidas quatro moléculas para serem estudadas, uma cianidina, uma salicilidina, uma benzoilcromona e uma espiropirana, que podem apresentar as seguintes conformações: *cyanidin purple* (cyp), *cyanidin blue* (cyb), *salicydene aniline yellow* (say), *salicydene red* (sar), *2-benzyl-3-benzoylchromone colorless* (bcc), *2-benzyl-3-benzoylchromone* (bco), *spiropyran colorless* (spc) e *spiropyran purple* (spp). No caso da cianidina, da salicidina e da cromona, a variação de cor se dá em função de diferentes protonações. Para a espiropirana (Fig. 1), são diferentes confôrmeros que absorvem em comprimentos de onda diferentes.

Foi empregado o método semi-empírico AM1 (conforme implementado no programa Gaussian 03) e foram realizadas otimizações de geometria, cálculo de frequência (para verificar se as estruturas obtidas se tratavam de mínimos) e de propriedades eletrônicas, como energia total e energia dos orbitais de fronteira.

Tabela 1. Resultados dos cálculos AM1 para as conformações dos corantes estudados

	E_T (a.u.)	E_{HOMO} (a.u.)	E_{LUMO} (a.u.)	Gap HOMO- LUMO (ua)
cyp	0,099	-0,451	-0,256	0,195
cyb	0,213	-0,123	0,082	0,205
say	0,046	-0,324	-0,023	0,301
sar	0,053	-0,300	-0,032	0,268
bcc	0,002	-0,350	-0,024	0,326
bco	0,020	-0,308	-0,028	0,280
spc	0,090	-0,322	-0,038	0,284
spp	0,169	-0,306	-0,072	0,234

Dentre as conformações analisadas para cada corante, os cálculos indicam (Tabela 1) que a cyp, a say, a bcc e a spc são as mais estáveis por apresentarem energia total menor. Foram calculadas também as energias dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO) e a diferença de energia entre eles (*gap*), uma vez que são esses os orbitais geralmente envolvidos nas transições. Qualitativamente, o método AM1 fornece *gap*'s condizentes com o comprimento de onda de absorção, ou seja, moléculas que absorvem apenas no ultravioleta têm *gap* maiores do os confôrmeros que absorvem no visível. Entretanto, no caso da cianidina, o *gap* calculado está invertido em relação às cores dos confôrmeros.

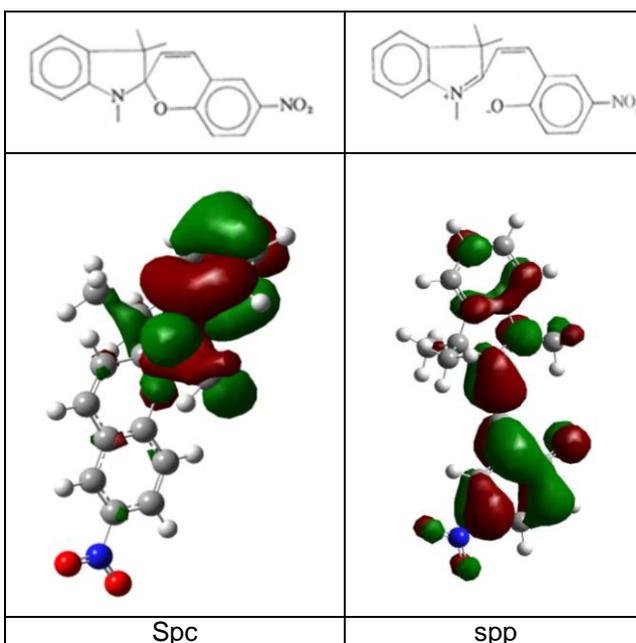


Figura 1: Estruturas e representação gráfica do HOMO para a espiropirana.

Conclusões

Embora o método AM1 forneça dados úteis ao entendimento das propriedades dos corantes estudados, em um dos casos, previu valores errôneos. Cálculos *ab initio* estão em andamento para comparar com as estruturas obtidas com AM1.

Agradecimentos

À FAPESP e à UFABC.

¹ Pure Appl.Chem., vol.73, no.4, Organic Photochromism (IUPAC Technical Report)

² P.J. Coelho, Quím, Nova vol.29, nº.3, 2006