



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Estudo fotofísico da Protoporfirina IX
Autor	ANA CAROLINA LONGONI DE CASTRO VICENTE
Orientador	PAULO FERNANDO BRUNO GONCALVES

Estudo fotofísico da Protoporfirina IX
IC: Ana Carolina L. C. Vicente Orientador: Paulo F. B. Gonçalves
Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Instituto de Química

A protoporfirina IX, é um heterociclo orgânico composto por quatro anéis pirrol. É um composto quelante que consegue se complexar com uma grande variedade de metais de transição, além disso, é uma biomolécula responsável pelo transporte de cátions bivalentes com grande importância biológica. Um exemplo desses complexos é o Heme, um grupo prostético, que quando ligado ao ferro com número de oxidação +2, forma a hemoglobina e mioglobina, que são responsáveis pelo transporte do oxigênio no dos seres vivos.

Além disso a protoporfirina pode se ligar a outros metais como Na, K, Li e metais bivalentes como o Co(II), Ni(II) e Cu(II)). Há vários complexos com diferentes metais que possuem atividades biológica, como metaloenzimas, como por exemplo, os complexos de cobalto presentes na vitamina B₁₂ e complexos de Zinco e Níquel que estão presentes medicamentos utilizados na terapia fotodinâmica.

Este trabalho tem como objetivo o estudo fotofísico da protoporfirina IX, onde será feito o estudo da molécula no estado fundamental e nos estados excitados. Para isso, inicialmente foi feita a análise conformacional da estrutura, onde a estrutura com a menor energia foi otimizada no estado fundamental e foram calculadas as frequências vibracionais. O estudo da fluorescência e da fosforescência está em fase de conclusão e os dados teóricos serão comparados com dados experimentais.

Para esse estudo, foi escolhido o método da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), implementado no programa Gaussian 09. Os funcionais testados para otimização do estado fundamental nesse estudo foram o PBE1PBE, CAM-B3LYP e o ω B97XD. Além disso foi analisado o efeito da correção de dispersão empírica no funcional CAM-B3LYP, e foi visto que não há uma grande efeito com a inclusão desta correção. O funcional escolhido para dar continuidade ao estudo foi o ω B97XD, pois gerou valores de energias de absorções mais próximas das experimentais. Os efeitos do solvente foram avaliados utilizando o Modelo do Continuum Polarizável (PCM), com dois solventes de diferentes constantes dielétricas que são o dimetilsulfóxido e o diclorometano.

Na análise conformacional a estrutura favorecida energeticamente é a estrutura em que há interação entre os ácidos carboxílicos, pois há uma estabilização pela ligação de hidrogênio intramolecular.

As energias de absorção molecular com o máximo de absorbância da protoporfirina IX obtidas experimentalmente para o solvente dimetilsulfóxido foi de 406 nm e o valor de energia para máximo de comprimento de onda absorvido é de 631 nm. Abaixo na tabela 1 encontram-se os comprimentos de onda para a absorbância máxima e para o comprimento de onda máximo.

Tabela 1- Os comprimentos de ondas teóricos obtidos para a Absorbância máxima e para o maior comprimento de onda.

	Máxima Absorbância	Máximo comprimento de onda
ω b97xd	372.42 nm	590.06 nm
CAM-B3LYP	373.96 nm	576.08 nm
PBE1PBE	361.11 nm	551.43 nm
CAM-B3LYP com dispersão	373.74 nm	575.54 nm