

Propriedades Eletrônicas e Acoplamento Spin-Órbita de Compostos Tetrapirrólicos

A geração de oxigênio singleto por moléculas que são usadas em aplicações na terapia fotodinâmica (TFD) requer a absorção de luz visível e uma transição de eletrônica de um estado excitado singleto para tripleto. Este último processo é conhecido como cruzamento intersistema (ISC). Para isso ocorrer o acoplamento spin-órbita (SOC) tem de ser grande o suficiente entre os dois estados. Compostos tetrapirrólicos como os corróis têm sido amplamente investigados e parecem ser potentes fotossensibilizadores. Eles têm longo tempo de vida no estado tripleto, alta absorção na janela terapêutica (550nm - 800nm) e alto rendimento quântico de oxigênio singleto. Neste trabalho avaliamos os espectros de absorção e os elementos de matriz SOC para a molécula de corrol com diferentes ligantes. A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) foi usada para determinar as propriedades estruturais e eletrônicas dos estados fundamentais, enquanto a DFT dependente do tempo foi empregada para calcular as propriedades dos estados excitados. Os elementos da matriz SOC entre os estados excitados singleto e tripleto são calculados por um método não iterativo usando o operador completo de Breit-Pauli. Os resultados obtidos para moléculas de corrol mostraram que todos os compostos podem ser fotossensibilizadores potentes para uso em terapia fotodinâmica.

Aluno de:

Mestrado

Referências bibliográficas

- Chiodo, S.; Russo, N., J. Comput. Chem. 29, 912-920, (2008)
RUNGE, E.; GROSS, E. K. Density-functional theory for time-dependent systems. Physical Review Letters, APS, v. 52, n. 12, p. 997, 1984.
Roeder, B., Laser Med. Sci. 5, 99-106, (1990)

Authors: ROCHA, Vinicius (Universidade Federal de Santa Maria); Dr PIQUINI, Paulo (UFSCar)

Presenter: ROCHA, Vinicius (Universidade Federal de Santa Maria)