OBTENÇÃO DO ESPECTRO ELETRÔNICO DO 4-(PIREN-1-ILIMINO)METILFENOL VIA TD-DFT

SILVA, G. A. (IFRN); LEAL, R. C. (IFRN)

Palavras Chave: Quimiossensor, TD-DFT, solvente implícito.

INTRODUÇÃO

A detecção de ânions presentes nas soluções é fundamental nos processos químicos e biológicos, nesse intuito, os quimiossensores têm sido muito utilizados nas últimas décadas para identificação de espécies químicas.¹

O presente trabalho tem como objetivo descrever, através de cálculos teóricos baseados na TD-DFT, o comportamento óptico do quimiossensor cromogênico 4-(piren-1-ilimino)metilfenol).

METODOLOGIA

Todos os cálculos foram realizados com o *software Gaussian 09W*.² As geometrias de equilíbrio foram obtidas, no vácuo, com funcional híbrido B3LYP e conjunto de base 6-31G(d). Após as otimizações, foram realizados cálculos TD-DFT (*Time Dependent - Density Functional Theory*) em diferentes meios (vácuo e DMSO) variando o funcional e o modelo de solvatação implícito, com o mesmo conjunto de funções de base. A largura à meia altura das bandas de absorção FWHM (*Full Width at Half Maximum*) foi ajustada em 1000 cm⁻¹ para obtenção de todos os espectros.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

As posições das bandas são comparadas entre si e com as informações experimentais. A Tabela 1 mostra que os melhores resultados foram obtidos quando utilizou-se o funcional M06-2X. Os aspectos qualitativos são apresentados na Figura 1.

Tabela 1- $\lambda_{\text{máx.}}$ (nm) para o 4-(piren-1-ilimino)metilfenol)

Modelo Teórico	B3LYP	M06-2X	PBE1	CAM-B3LYP	ω B97XD	B2PLYP	DAM
Vácuo	357 [27]	374 [10]	347 [37]	366 [18]	360 [24]	355 [29]	24,2
PCM	359 [25]	365 [19]	403 [18]	361 [23]	357 [27]	352 [32]	24
IEFPCM	359 [25]	365 [19]	403 [18]	361 [23]	357 [27]	352 [32]	24
COSMO	359 [25]	364 [20]	401 [16]	361 [23]	357 [27]	352 [32]	23,8
SMD	359 [25]	363 [19]	400 [17]	360 [24]	356 [28]	351 [33]	24,3
CPCM	359 [25]	363 [19]	403 [18]	362 [22]	357 [27]	352 [32]	23,8
DAM	25,3	17,7	20,7	22,2	26,7	31,7	#

[1] Exp. (DMSO) = 384 nm

Figura 1- Espectro teórico UV-VIS do 4-(piren-1-ilimino)metilfenol) obtido por diferentes funcionais

CONCLUSÃO

Independente do modelo de solvatação implícito utilizado não existe diferença significativa no Desvio Absoluto Médio (DAM). O funcional M06-2X foi o que apresentou melhor desempenho e será utilizado, portanto, no estudo seguinte da interação sensor-analito.

REFERÊNCIAS

- MARINI, V. G.; et al. *J. Braz. Chem. Soc.*, Vol. 23, 1488-1500, 2012.
- <<http://www.gaussian.com>. Acessado em, agosto de 2016.