

Espectros de fluorescência e UV-vis do complexo morin- Mg^{2+} usando a teoria do funcional da densidade dependente do tempo (TD-DFT)

A. M. de Arandas¹, A. B. F. da Silva¹, A. R. Guimarães¹, M. H. Gehlen¹

¹*Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, Brasil*

O morin (3, 5, 7, 2', 4' pentahidroxiflavona) é um composto polifenólico com reconhecidas propriedades antioxidantes, sendo encontrado em diversas espécies de plantas. Inúmeros estudos de valor experimental^[1,2] e teórico^[3,4] deste flavonóide complexado com metais têm sido vastamente investigados. Contudo, estudos deste composto complexado com magnésio ainda não foram investigados, sendo necessário um detalhamento teórico das transições eletrônicas e atribuições das bandas do espectro eletrônico para melhor compreender a relação existente entre as propriedades fotoquímicas e o comportamento destas transições. Tais informações foram adquiridas utilizando o formalismo da teoria do funcional da densidade dependente do tempo (TD-DFT) usando os funcionais B3LYP com os conjuntos de base 6-311G++(d,p) e 6-31Gd.

O propósito deste trabalho é usar a teoria do funcional da densidade para entender o efeito do magnésio na estrutura da molécula de morin e das suas propriedades eletrônicas, para assim compreender a origem do surgimento da fluorescência e da absorção molecular.

Os resultados teóricos utilizando TD-DFT concordam com os valores experimentais, quando as comparações são possíveis. Pode-se verificar que os picos nos espectros de absorção são caracterizados por excitações de elétrons de orbitais HOMO para LUMO por transições de caráter singuleto-singuleto. Este mesmo raciocínio é válido para análise dos espectros de emissão de fluorescência.

Palavras-chave: Fluorescência, TD-DFT, espectro eletrônico, morin- Mg^{2+} , absorção UV-vis, transições singuleto.

- [1] Q. K. Panhwar, S. Memon, *Journal of Coordination Chemistry*. **65**, 1130-1143, (2012).
- [2] G. Pina-Luis, G. A. R. Pina, A. C. V. Gonzalez, A. O. Teran, I. R. Espejel, M. E. Diaz-Garcia, *Reactive & Functional Polymers*. **72**, 61-68, (2012).
- [3] M. Tischer, O. Hjortstam, D. Arvanitis, O. Eriksson, *Journal of Molecular Structure*. **995**, 134–141, (2011).
- [4] Z. Markovic, D. Milenkovic, J. Dorovic, J. M. D. Markovic, V. Stepanic, B. Lucic, D. Amic, *Food Chemistry*. **134**, 1754-1760 (2012).

andersonarandas@iqsc.usp.br, Universidade de São Paulo, Instituto Química de São Carlos, Laboratório de Fluorescência Molecular, Av. Trabalhador São-Carlense, 400 – Centro – 13566-590 – São Carlos, SP.