



**UMA NOVA PERSPECTIVA DA CARACTERIZAÇÃO DOS ESTADOS EXCITADOS DO
ÁCIDO ASCÓRBICO: ANÁLISE DE CHARGE-TRANSFERY.**

Yago Francisco Lopes – yagolopes-f@hotmail.com
IFG/Anápolis

Lilian Tatiane Ferreira de Melo Camargo – lilianthaty@yahooh.com.br
IFG/Anápolis

Projeto de Pesquisa de Pós-Graduação



INTRODUÇÃO

A vitamina C é um nutriente essencial para o ser humano, sendo fundamental em diversos processos bioquímicos. Entre as suas propriedades, podemos citar as atividades antioxidantes e fotobioquímicas que auxiliam o organismo a neutralizar os radicais livres. Nas últimas décadas, houve um aumento significativo nos números de pesquisas sobre as propriedades fotoquímicas da vitamina C. Este aumento se deve a sua importância na atividade protetora contra radiação UV.¹ A partir dessas características tem se desenvolvido vários produtos como fotoestabilizadores, cosméticos, protetores solares, células fotovoltaicas, células solares orgânicas (OPV'S).³

PROBLEMA DE PESQUISA

Compreender o comportamento de transferência de carga do Vitamina C, para contribuir com o processo de otimização em células solares orgânicas (OPV'S).

OBJETIVO

Este trabalho tem o intuito de fornecer uma análise minuciosa dos estados excitados da Vitamina C, além de trazer uma abordagem sistemática sobre a caracterização dos seus respectivos estados excitados.

MÉTODOS

Os cálculos teóricos foram realizados usando o nível de teoria TD-DFT/CAM-B3LYP/cc-pVTZ implementado no programa g09. As análises de transferência de cargas foram obtidas com a ajuda do programa Multiwfn Version 3.7.

RESULTADOS

Os estados excitados foram caracterizados a partir do valor de Δr , que nos dá uma predição do deslocamento da densidade eletrônica da molécula no respectivo estado excitado, visto que quanto maior o valor de Δr maior será a transferência de carga.

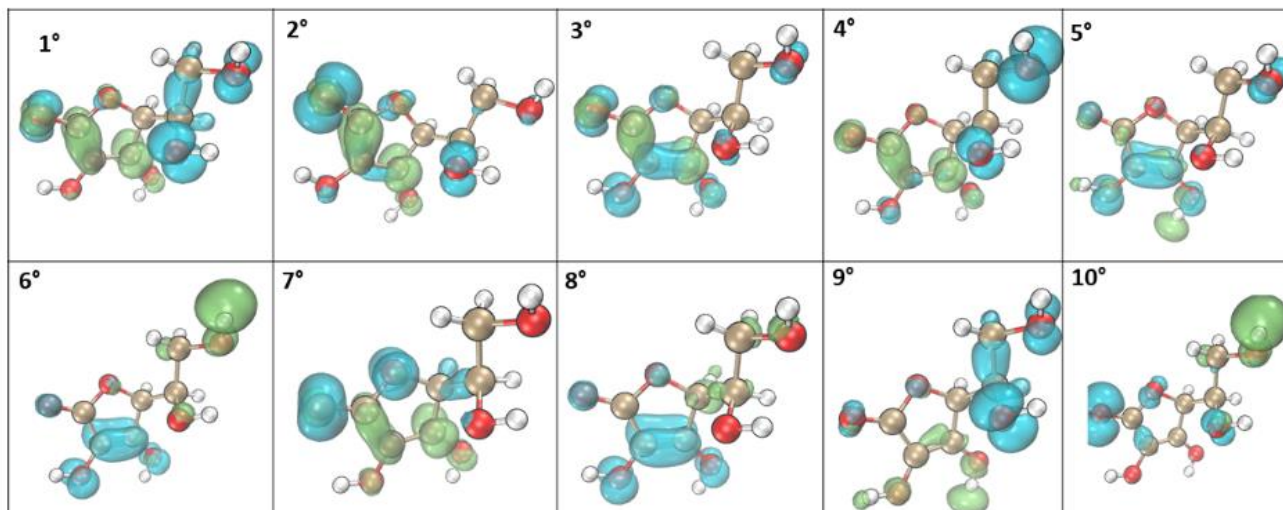
Tabela 1: Valores de Δr (Å) para os respectivos estados excitados.

Estado excitado	1°	2°	3°	4°	5°	6°	7°	8°	9°	10°
Δr (Å)	1,38	1,66	1,34	3,53	1,31	4,57	1,75	3,18	2,72	3,01

Observa-se na Tabela 1 acima que os maiores valores de Δr são observados para os estados 4°, 6°, 8°, 9° e 10°, assim para os respectivos estados excitados podem ser caracterizados com a natureza de *charge-transfer*. Nos estados excitados 1°, 2°, 3°, 8° e 7° podem ser caracterizados como uma natureza de *local-excitation*.



Figura 1: Hole-Electron dos Estados excitados da Vitamina C.



Observa-se na Figura 1 uma representação visual da deslocalização de carga, em azul está representado de onde o elétron saiu chamado de (*Hole*) e em verde para onde o elétron foi chamado de (*eletron*), a partir disso pode-se observar que nos 4°, 6°, 8°, 9° e 10° estados excitados são da natureza de *charge-transfer* visto que ocorre uma deslocalização da densidade eletrônica para as extremidades da molécula do AA, já para os 1°, 2°, 3°, 8° e 7° observa-se que a excitação é localizada predominantemente em apenas um local da molécula, assim sendo caracteriza como uma natureza de *local-excitation*.

REFERÊNCIAS

BARROSO, E. D. **Estudo do Efeito da Solvatação Aquosa sobre os parâmetros geométricos do Ácido L-Ascórbico usando a Dinâmica Molecular de CAR-PARRINELLO**. Programa De Pós-graduação Stricto Sensu em Ciências Moleculares, v. 1, p. 68, 2012.

BERG, R. W. **Investigation of L (+)-ascorbic acid with raman spectroscopy in visible and UV light**. Applied Spectroscopy Reviews, v. 50, n. 3, p. 193–239, 2015.
DABBAGH, H. A.; AZAMI, F.; FARROKHPOUR, H.; CHERMAHINI, A. N. **UV-VIS, NMR and FT-IR spectra of tautomers of vitamin C. experimental and DFT calculations**. Journal of the Chilean chemical Society, v. 59, n. 3, p. 2588–2594, 2014.