

# Desenvolvimento de Software para Simulação de Supressão Dinâmica da Luminescência com Fins Didáticos.

Lauro Camargo Dias Júnior<sup>1</sup> (PQ)\* e João Batista Marques Novo<sup>1</sup> (PQ)

Email: laurocd@ufpr.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná – Caixa Postal 19081, Curitiba-PR; CEP 81531-990

Palavras-Chave: luminescência, software

## Introdução

A luminescência de uma molécula eletronicamente excitada ( $M^*$ ) pode ser suprimida se esta interagir com uma molécula supressora (Q). Dentre os processos que competem com a luminescência tem-se a supressão dinâmica, que é controlada por difusão, pois requer a aproximação mútua entre  $M^*$  e Q. O tempo de vida ( $\tau$ ) e a intensidade de luminescência ( $I$ ) de  $M^*$  diminuem com o aumento na concentração do supressor ( $[Q]$ ) conforme previsto pela Equação de Stern-Volmer apresentada nas seguintes formas:

$$\tau_0/\tau = 1 + k_q \tau_0 [Q] \quad (\text{Eq. 1})$$

$$I_0/I = 1 + k_q \tau_0 [Q] \quad (\text{Eq. 2})$$

onde  $I_0$  e  $\tau_0$  correspondem aos valores de  $I$  e  $\tau$  quando  $[Q]=0$  e  $k_q$  é a constante de velocidade para o processo bimolecular de supressão (no caso  $k_q \approx k_{\text{difusional}}$ ). Plotando-se  $\tau_0/\tau$  (ou  $I_0/I$ ) versus  $[Q]$  obtém-se uma reta cuja tangente corresponde ao produto  $k_q \tau_0$  chamado de constante de Stern-Volmer ( $K_{SV}$ ).<sup>1</sup> Foi desenvolvido um software em linguagem BASIC para compilador FreeBASIC<sup>2</sup> com fins didáticos para a simulação desta cinética utilizando-se o método de Monte Carlo para sorteio das moléculas. Este método permite a investigação do sistema sem a necessidade de se conhecer, a priori, equações diferenciais complexas. O software está disponível na internet.<sup>3</sup> e as seguintes etapas são executadas: 1) sorteio das posições e velocidades iniciais das moléculas M e Q presentes dentro de uma caixa; 2) determinação das trajetórias e dos tempos de colisão destas moléculas; 3) sorteio da probabilidade de uma colisão resultar em supressão; 4) cômputo das moléculas suprimidas em função do tempo e, 5) apresentação dos gráficos no monitor.

## Resultados e Discussão

Através das simulações obtiveram-se as curvas de decaimento de  $M^*$  em função do tempo para diferentes valores de  $[Q]$  (Fig. 1). As tangentes destas curvas fornecem os tempos de vida  $\tau$  que foram plotados na forma de  $\tau_0/\tau$  versus  $[Q]$  (Fig. 2). Observa-se o comportamento linear conforme previsto pela Eq. 1 cuja tangente fornece  $K_{SV}$  e  $k_q$ . É possível alterar os parâmetros tais como o número de moléculas presentes, a densidade, e a velocidade máxima. As unidades são arbitrárias e

possibilitam conversão para escalas de diferentes ordens de grandeza.

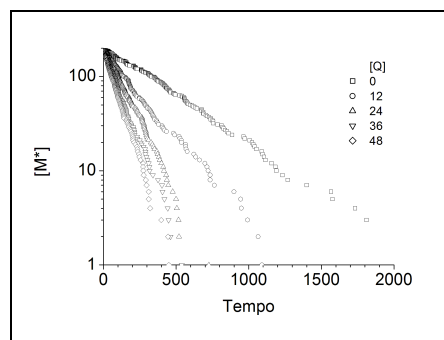


Figura 1. Simulação da diminuição da concentração de  $M^*$  em função do tempo com o aumento de  $[Q]$  (unidades arbitrárias).

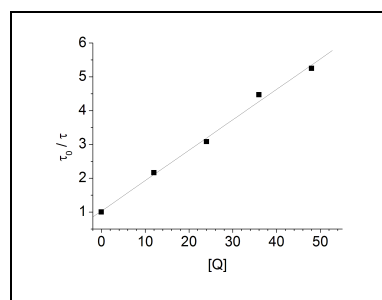


Figura 2. Simulação da diminuição de  $\tau$  versus  $[Q]$  resultando na Equação de Stern-Volmer – Eq. 1 – com unidades arbitrárias.

## Conclusões

O software contribui para a compreensão de equações cinéticas utilizadas em espectroscopia. Através do ajuste dos parâmetros e da conversão das unidades é possível ao usuário simular diferentes condições experimentais e discutí-las em sala de aula em termos de propriedades tais como o efeito da viscosidade, da temperatura e concentração.

## Agradecimentos

Universidade Federal do Paraná (UFPR)

- 1) TURRO, Nicholas. **Modern Molecular Photochemistry**. Sausalito: University Sciences books, 1991. p.245-248.
- 2) DIAS, Lauro C. e NOVO, João B. M.. **Software SternVolmer**. Disponível em <<http://www.quimica.ufpr.br/jbmno>>. Acesso em: 09 maio 2012.
- 3) VICTOR, Andre. **FreeBASIC Compiler**. Disponível em <<http://www.freebasic.net>>. Acesso em 09 maio 2012.