

Química

## **ESTRUTURAS MOLECULARES DOS COMPLEXOS [Re(bpy)(CO)<sub>3</sub>X] X=F e Cl: UM ESTUDO DFT**

Claudinei Junior Coutinho Correa - 8 Período de Química, UFLA, iniciação científica voluntária

Ana Luiza Augusta de Moura - 8 Período de Química, UFLA, iniciação científica voluntária

Kátia Júlia de Almeida - Orientador DQI, UFLA. - Orientador(a)

### **Resumo**

Atualmente, o crescente interesse por fontes alternativas de energia tem motivado um grande número de estudos em diferentes linhas de pesquisa. A energia solar surge como uma alternativa promissora devido ao seu baixo impacto ambiental e sua ampla disponibilidade de oferta. Contudo, o seu uso efetivo em larga escala é ainda pouco expressivo, considerando seu alto custo de aquisição e a baixa eficiência (menor que 30%) de seus processos de captação, conversão e armazenamento da energia solar. Neste sentido, a fotossíntese artificial apresenta um grande potencial, uma vez que na presença de substâncias abundantes, como água e CO<sub>2</sub>, a energia solar captada é transformada e armazenada na forma de energia de ligações químicas. Neste trabalho, um estudo computacional, baseado na teoria do funcional de densidade (DFT), foi realizado para a determinação das estruturas moleculares de dois catalisadores eficientes no processo de fotoredução do CO<sub>2</sub>, que é um dos passos necessários para o desenvolvimento racional da fotossíntese artificial. Para isso diferentes funcionais de densidade (B2PLYP, B3LYP, M06 e M06L) foram utilizados. As moléculas e suas figura foram construídas no software Molden. Todos os cálculos foram realizados no programa Orca. Os resultados obtidos indicam uma boa performance desses funcionais na descrição de grande parte dos ângulos e ligações químicas desses complexos. O melhor acordo com os dados experimentais disponíveis foi obtido usando o funcional M06. Resultados interessantes foram também obtidos para as energias associadas aos estados eletrônicos fundamental (Singleto) e excitado (Tripleto) de ambos os complexos investigados.

Palavras-Chave: Fotossíntese Artificial, Energia Solar, complexo [Re(bpy)(CO)<sub>3</sub>Cl].

Link do pitch: <https://www.youtube.com/watch?v=602RSNKfdOQ>