

Química

ESTRUTURA MOLECULAR DFT DO COMPLEXO fac-[Re(CO)₃(bpy)Cl]

Letícia Lanael Santos da Silva - 8º módulo de Química, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA

Katia Júlia de Almeida - Orientadora DQI, UFLA. –Orientador (a) - Orientador(a)

Resumo

Atualmente, a busca por fontes de energia alternativa tem sido foco de diversos estudos devido à escassez e aos problemas ambientais causados pela utilização de combustíveis fósseis. A energia solar é de grande interesse devido ao seu baixo impacto ambiental e sua grande oferta de energia. Contudo, sua utilização é ainda pouco expressiva (< 10%) devido ao alto custo e a ineficiência dos seus processos captação, conversão e armazenamento da energia. Uma alternativa promissora seria por meio da fotossíntese artificial, que, na presença de substâncias abundantes, tais como CO₂, H₂O e radiação solar, converte e armazena a energia captada na forma de ligações químicas, como ocorre nos organismos fotossintéticos. O presente estudo tem como objetivo determinar a estrutura molecular do complexo fac-[Re (CO)₃(bpy)Cl], usando para isso cálculos quânticos baseados na teoria do funcional de densidade (Density Functional Theory - DFT). Diferentes funcionais de densidade e conjuntos de bases atômicos foram utilizados. Para a descrição do Re(I), pseudo-potenciais relativísticos foram empregados. Os principais resultados indicam que as metodologias empregadas foram capazes de descrever adequadamente a geometria do complexo investigado. Contudo, os melhores resultados, em comparação com os dados experimentais de raio-X, foram obtidos usando o funcional híbrido B2PLYP/LANTZV(f). As diferenças entre os valores experimentais e teóricos foram obtidas de 1,913 a 1,935 Å para as ligações Re-CO, enquanto para as ligações Re-N e Re-Cl esses valores ficam em torno de 2,180 Å e 2,467 Å, respectivamente. Apenas as ligações diretamente formadas com o centro metálico de Re(I) foram consideradas para comparação. Isso é devido ao fato que essas ligações químicas estão diretamente relacionadas ao desdobramento dos níveis de energia eletrônicos (efeitos do campo ligante), que compreendem as propriedades fotofísicas desse complexo e estão associadas à atividade catalítica desse complexo na fotoredução do CO₂, passo esse essencial para a fotossíntese artificial.

Palavras-Chave: Fotossíntese artificial, Catalisador de Re (I), Redução do CO₂.

Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: <https://youtu.be/etJRUFyWe3g>