CONQUIAMB
Congresso Online Nacional de Química Analítica e Ambiental

CÁLCULO DO ESPECTRO DE ABSORÇÃO DA SÍNTESE E ANÁLISE ESTRUTURAL DE COMPLEXOS DE RÓDIO (I) CONTENDO ALIL E CIANOALQUILFOSFINAS.

Congresso Online Nacional De Química Analítica E Ambiental., 1ª edição, de 26/10/2020 a 30/10/2020
ISBN dos Anais: 978-65-86861-45-7

MORAIS; JEFFERSON LORENÇONI DE [1], SILVA; JOÃO ANTÔNIO GONÇALVES E [2], VALVERDE; CLODOALDO [3], SHARMA; VIKAS MAHENDRA [4], LOPES; YAGO FRANCISCO [5], SOUSA; WILKER CÁSSIO [6]

RESUMO

Uma série de compostos de acetilacetonato - carbonil - ródio,substituídos por fosfinas funcionalizadas,foi preparada com bons a excelentes rendimentos pela reação de [Rh (acac) (CO)2] (acac é acetilacetonato) com o alil-, cianometil- ou correspondentes fosfinas substituídas com cianoetil. A Fosfina tem um nome comum conhecido popularmente como hidreto de fósforo (PH3),também conhecido como Fosfano e, eventualmente de Fosfamina. Ela possui características de um gás incolor inflamável em uma temperatura de ebulição de -88oC. Possuindo as características de geometria piramidal trigonal com simetria molecular C3V e contém uma massa molar 33,997 g/mol. A Fosfina tem aplicação na agricultura, servindo como um tratamento de expurgo e contra pragas em lavouras e principalmente na plantação de milho, feijão e aplicação de armazenamento de grãos. Também possui aplicações na medicina em tratamentos como anti- tumural, anticâncer, anti-diabetes. Apresenta grande potencial de inovação tecnológica médica e agroindustrial com aplicações em produtos e serviços que apresentam responsabilidade socioambiental. Sendo assim os cálculos foram feitos com o pacote Software Gaussian 09 e otimizados na faixa ultravioleta visível pelo método DFT (Teoria do Funcional da Densidade) com o funcional CAM/B3LYP, e na base 6-311+G,(d,p) onde foi possível ver as interações de transição ocorrendo em seus correspondentes receptores e doadores de elétrons,e através dos cálculos de absorção, conseguimos ver as transições com maior nível de excitação,os pontos que mais absorvem e os pontos que não apresenta troca de energia. Também foi utilizado dados teóricos e experimental para verificar a severidade dos dados para sua coesão final,e assim conseguirmos compreender o funcionamento de cada interação e possível estudo de desenvolvimento de um novo fármaco para aplicação na saúde ou produto agroecológico.

PALAVRAS-CHAVE: Fosfina, Geometria Molecular, Cálculos do Espectro de

[1] UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, lorenconi12112009@hotmail.com
[2] Instituto Federal de Goias - Campus: Rio Verde, joao.antoniogs@hotmail.com
[3] Universidade Paulista - UNIP, valverde@ueg.br
[4] Kavayitri Bahinabai Chaudhari North Maharashtra University, vikaschemicalscience@gmail.com
[5] Jalgaon, yagolopes-f@hotmail.com
[6] India, eng.wilker@yahoo.com

Absorção, DFT.

[1] UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, lorenconi12112009@hotmail.com
[2] Instituto Federal de Goias - Campus: Rio Verde, joao.antoniogs@hotmail.com
[3] Universidade Paulista - UNIP, valverde@ueg.br
[4] Kavayitri Bahinabai Chaudhari North Maharashtra University, vikaschemicalscience@gmail.com
[5] Jalgaon, yagolopes-f@hotmail.com
[6] India, eng.wilker@yahoo.com