



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 acetilacetato - carbonil - ródio, substituídos por fosfinas funcionalizadas, foi preparada com bons a excelentes rendimentos pela reação de $[Rh(acac)(CO)_2]$ (acac é acetilacetato) com o alil-, cianometil- ou correspondentes fosfinas substituídas com cianoetil. A Fosfina tem um nome comum conhecido popularmente como hidreto de fósforo (PH_3), também conhecido como Fosfano e, eventualmente de Fosfamina. Ela possui características de um gás incolor inflamável em uma temperatura de ebulição de $-88^\circ C$. Possuindo as características de geometria piramidal trigonal com simetria molecular C_{3v} 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- tumoral, 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 conseguimos 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 Goiás - Campus: Rio Verde, joao.antonio@ueg.br

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

