



Título: Investigação teórica de propriedades estruturais e físico-químicas de complexos de lantanídeos

Discente: Daniel Mungo Brasil

Orientador: Prof. Dr. Leandro Moreira de Campos Pinto

A química computacional utiliza recursos de computação para a resolução de complicadas equações matemáticas que dão informações sobre as propriedades físico-químicas de sistemas multieletrônicos. Estas equações podem ser originadas da mecânica clássica, método chamado de mecânica molecular, ou da mecânica quântica, métodos ab initio e Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Este último foi escolhido para desenvolvimento do presente trabalho. A teoria DFT, porém foi desenvolvida para cálculos de propriedades do estado fundamental, para cálculos envolvendo estados excitados se utiliza sua extensão, a Teoria do Funcional da Densidade Dependente do Tempo (TD-DFT). Na realização destes cálculos é necessária uma função de base (equações para os orbitais atômicos) e o funcional de troca e correlação eletrônica (equação para a densidade eletrônica). Complexos de lantanídeos possuem diversas aplicações, desde fármacos a dispositivos conversores de luz, por isso existe um grande interesse no estudo e compreensão destes materiais. Neste trabalho foram estudados três complexos de lantanídeos, um formado pelo íon gadolínio(III) com o ligante usnato, e dois formados pelo ligante 3,5-dimetoxibenzoato monocarboxilato com os íons lantânio(III) e cério(III). Os cálculos foram feitos utilizando os programas Gaussian 16 e ORCA 4.0.1, com o funcional B3LYP e a base def2-SVP para os átomos leves. Já para os lantanídeos foi empregada a base def2-TZVP em conjunto com o potencial efetivo de caroço adequado. Foram realizados cálculos de otimização de geometria, obtenção dos espectros de infravermelho e de absorção da região do ultravioleta-visível para todos os complexos. Também foram obtidas representações dos orbitais moleculares para analisar o espectro eletrônico. Nos três compostos estudados, o espectro teórico de infravermelho condiz com seu respectivo espectro experimental, os espectros de absorção apresentam um pequeno deslocamento comparados aos espectros experimentais, mas o formato das bandas são correspondentes. Os dados teóricos apresentaram boa concordância com os dados experimentais comprovando que os métodos computacionais podem ser utilizados para o entendimento da geometria, da estrutura eletrônica e na elucidação dos espectros eletrônicos.

Palavras-chave: DFT; TD-DFT; lantanídeos; espectroscopia