

ESTUDOS TEÓRICOS DAS PROPRIEDADES VIBRACIONAIS E ELETRÔNICA DOS COMPLEXOS DO TIPO $[\text{Ru}(\text{BPY})_2(1,4\text{-DT})(\text{L})]_n^+$, EM QUE $\text{L} = \text{NO}$ OU NO_2^- .

Guthyery Prado de Oliveira Costa, Bruna Talia dos S Carvalho, Tercio de Freitas Paulo

O avanço contínuo na capacidade de processamento de dados, o desenvolvimento de programas, funcionais e conjuntos de bases mais eficientes tornou a teoria do funcional da densidade (do inglês, density functional theory – DFT) um método avançado e eficiente. Usando DFT é possível calcular com boa aproximação, as propriedades estruturais, vibracionais e eletrônica de compostos de coordenação. Dentre as várias possibilidades de aplicação de compostos de coordenação, àqueles capazes de doar óxido nítrico (NO) têm despertado grande interesse científico. Estes são usados como ferramentas de estudos dos mecanismos de liberação e captação de NO. Entretanto, as propriedades eletrônicas desses sistemas, como a interação metal/NO e o mecanismo de liberação ainda não são bem compreendidos. Sendo assim, cálculos computacionais são essenciais para o estudo desses complexos. Nesse contexto, objetivo deste trabalho é a realização de cálculos quânticos computacionais usando a DFT para estudar as propriedades eletrônicas, vibracionais e estruturais dos complexos do tipo $\text{cis-}[\text{Ru}(\text{bpy})_2(1,4\text{-dt})(\text{L})]_n$, onde $\text{L} = \text{NO}$ (1), NO_2^- (2). As geometrias dos complexos foram otimizadas ao nível de teoria DFT/B3LYP/6-311(d,p)/LANL2DZ. A partir das estruturas otimizadas calculou-se os dados vibracionais e as propriedades eletrônicas dos complexos como: energia dos orbitais, as transições eletrônicas, os espectros eletrônicos para avaliar a natureza das transições. Para o íon complexo 1, o espectro de IR calculado apresenta uma banda intensa em 1843 cm^{-1} atribuída ao estiramento $\nu(\text{NO})$. Enquanto 2 apresenta bandas de baixas intensidades em 1468 , 1360 , 833 e 601 cm^{-1} atribuídas aos modos vibracionais do NO_2 . Nos espectros de UV-Vis, as bandas de menor energia dos complexos 1 e 2 resulta de transições em 280 e 295 nm , respectivamente. Estas transições têm caráter de transferência de carga metal-ligante (TCML). Os espectros vibracionais e eletrônicos apresentaram boa concordância com os dados experimentais.

Palavras-chave: DFT. Nitrosilo complexos. Óxido Nítrico. Rutênio.