



Ils06-012

Estudo teórico do complexo de coordenação de Cu(II) com 1,10-fenantrolina e L-serina

Ramos, M.C.(1); Viana, J.R.(1); Santos, A.O.(1); Lage, M.R.(1);

(1) UFMA;

A compreensão de propriedades e da formação de complexos de coordenação constituídos de íons de metais de transição, com aminoácidos e agentes quelantes como ligantes, é objeto de estudo de diversos pesquisadores, já que esses complexos são importantes, apresentando diversas aplicações. Deste modo, estudos teóricos têm sido realizados, viabilizando a análise de arranjos estruturais, eletrônicos e termodinâmicos de complexos de coordenação. Neste trabalho, cálculos DFT foram realizados no estudo de complexo formado a partir da coordenação de cobre(II) a 1,10-fenantrolina, L-serina e a uma molécula de água. Os cálculos DFT foram realizados com o software Gaussina16, utilizando o funcional PBE1PBE, com o conjunto de funções de base 6-311++G(d,p) para o átomos H, N, C e O, enquanto o conjunto de funções de base SDD, incluindo o pseudo-potencial, foi usado para para o Cu. O efeito de solvatação foi considerado nos cálculos, utilizando o método de solvatação implícita IEFPCM e o solvente metanol. A geometria otimizada mostra que o íon Cu(II) é cercado por cinco átomos ligantes, o que corresponde à geometria piramidal quadrada. A variação da energia de Gibbs e variação de entalpia, correspondentes à complexação, são -188,65 e -219,86 kcal/mol, respectivamente. O mapa de potencial eletrostático indicou que as regiões mais nucleofílicas correspondem à região do ligante 1,10-fenatrolina e ao redor do íon Cu(II), enquanto regiões eltrofílicas estão próximas aos átomos de O no complexo. Os orbitais moleculares de fronteira calculados mostram o HOMO presente principalmente no outro ligante, o aminoácido, e ao redor do Cu(II), ao passo que o LUMO está mais concentrado na fenantrolina, sendo as energias desses orbitais -7,50 e -2,74 eV, respectivamente. O gap(HOMO–LUMO), portanto, é de 4,76 eV, o que sugere que o complexo seja estável. Os valores dos índices de reatividade química calculados, potencial químico, dureza e maciez, são de -5,12, 2,38 e 0,42 eV, respectivamente. Em geral, os parâmetros geométricos observados a partir da geometria otimizada obtida estão em boa concordância com resultados experimentais disponíveis na literatura. A partir dos parâmetros termodinâmicos calculados, confirmamos que a formação do complexo é espontânea e exotérmica, com o valor de potencial químico calculado também indicando que o complexo seja estável. R. M. Esparza, E. Molins, J. L. B. Penalva, L. R. Ramírez, R. Redón, Acta Cryst. C, v. 51, p. 1505, 1995. N. T. Rahmouni, N. H. Bensiradj, S. A. Megatli, S. Djebbar, O. B. Baitich, Spectrochim. Acta Part A: Molec. Biomolec. Spectrosc. v. 213, p. 235, 2019.