



UNICAMP

PIBIC 2010



Instituto de Química

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE UM COMPLEXO TRINUCLEAR DE Ru(III) UTILIZANDO ÁCIDO TEREFTÁLICO

Ricardo B. Ferreira (IC –FAPESP, ricardobferreira@gmail.com) e André L. B.

Formiga (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

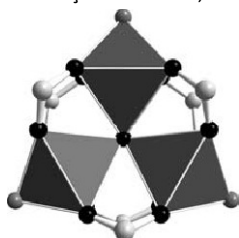
www.iqm.unicamp.br/~formiga

palavras chave : rutênio, trinucleares, complexos metálicos



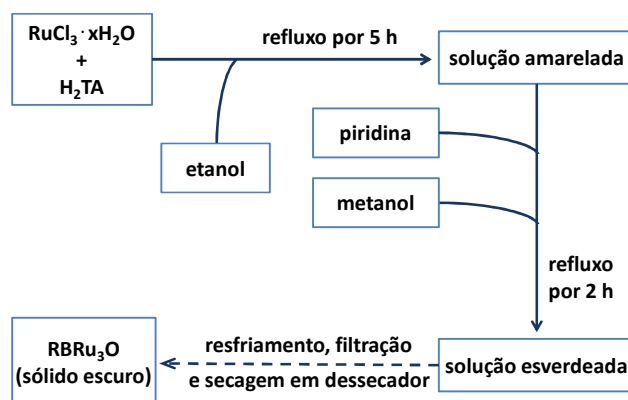
Introdução

Vários compostos trinucleares de rutênio contendo ponte oxo do tipo $Ru_3O(RCOO)_6L_3$ são relatados na literatura contendo uma variedade de ligantes carboxilato ($RCOO^-$), como acetato ou formato, e de moléculas (grupos L), como piridina ou água, na esfera de coordenação metálica. Alguns destes complexos são bastante conhecidos pela sua grande atividade catalítica na oxidação de alcoóis, cicloexeno e ciclohexano. [1,2]



Desta maneira, há um grande interesse no estudo do comportamento deste tipo de compostos. Este projeto visa a síntese e a caracterização de um composto trinuclear de rutênio, utilizando, como ligante carboxilato, o tereftalato, que apresentaria grupos carboxilato livres nas extremidades dos ligantes $RCOO^-$.

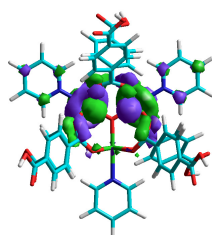
Parte Experimental



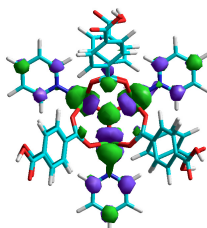
Resultados e Discussões

MODELAGEM MOLECULAR

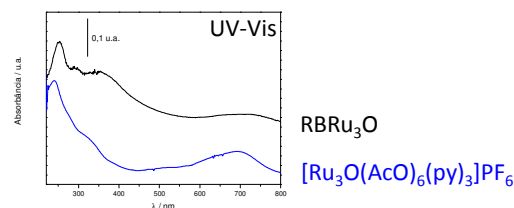
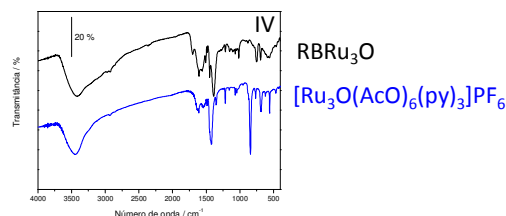
Otimização da geometria por MM+ e cálculo dos orbitais moleculares pelo método semi-empírico ZINDO/S utilizando um algoritmo de gradiente conjugado de Polak-Ribiere.



SOMO
-6.815912 eV



LUMO
-3.690443 eV



Conclusões

A partir do desenvolvimento deste projeto de pesquisa, pôde-se concluir que:

- Estudos de modelagem molecular usando cálculos computacionais geraram uma geometria otimizada com energia negativa, indicando que o complexo pode existir em termos termodinâmicos;
- A síntese do complexo trinuclear de Ru(III) utilizando ácido tereftálico como ligante carboxílico produziu um sólido escuro;
- Os espectros nas regiões do infravermelho e do ultravioleta e visível do sólido obtido se assemelham com os espectros do trinuclear de Ru(III) utilizando acetato como ligante carboxilato, concordando com a obtenção do complexo pretendido.

Referências

- [1] Toma, H. E.; Araki, K.; Alexiou, A. D. P.; Nikolaou, S.; Dovidauskas, S. *Coord. Chem. Rev.* **219-221** (2001) 187-234.
- [2] Nunes, G. S.; Alexiou, A. D. P.; Araki, K.; Formiga, A. L. B.; Rocha, R. C.; Toma, H. E. *Eur. J. Inorg. Chem.* (2006) 1487-1495.

Agradecimentos

