



Laboratório de  
Química de Coordenação

## MODELAGEM MOLECULAR DE CIANOMETALATOS

Willian Francisco Cordeiro Dantas (IC), Prof. Dr. André Luiz Barboza Formiga (Orientador),  
Laboratório de Química de Coordenação – Departamento de Química Inorgânica - Instituto de Química - Universidade Estadual de  
Campinas. CP 6154, Cidade Universitária, Campinas-SP

[formiga@iqm.unicamp.br](mailto:formiga@iqm.unicamp.br) [www.iqm.unicamp.br/~formiga](http://www.iqm.unicamp.br/~formiga) [willianfcd@gmail.com](mailto:willianfcd@gmail.com)

Palavra chave: Cianometalatos – Modelagem Molecular – Química de Coordenação

### RESUMO

O uso de métodos computacionais tem grande importância na química, pois a partir deles podemos determinar propriedades qualitativas e quantitativas das moléculas que estão sendo estudadas. Neste trabalho visamos estudar sistematicamente os métodos computacionais à disposição na descrição das geometrias e propriedades dos cianometalatos da primeira série de transição em diversos estados de oxidação. Para esse fim, métodos semiempíricos e *ab initio* serão empregados e os resultados serão confrontados com dados experimentais disponíveis na literatura, e a partir desses resultados poderemos saber qual o melhor método computacional que pode ser utilizado para o cálculo das propriedades destes compostos.

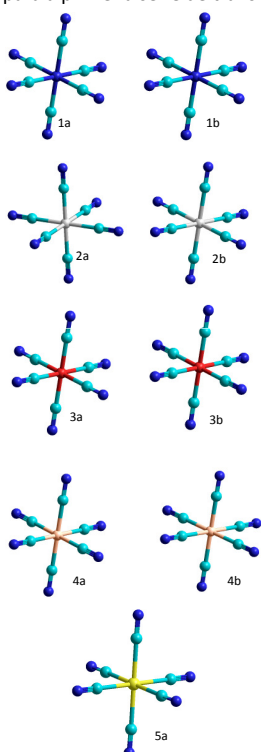
### AGRADECIMENTOS



Conselho Nacional de Desenvolvimento  
Científico e Tecnológico

### RESULTADOS

Resultados dos cálculos PM3 para a primeira série de transição:



As figuras mostradas acima são as estruturas obtidas com a otimização da geometria dos complexos de Co, Cr, Fe, Mn e Ti, respectivamente, hexacoordenados com grupos CN, possuindo a fórmula geral:  $[M(CN)_6]^n$  onde n é a carga do complexo. Todos os metais possuem o seu nox igual a 2+ (figuras a) ou 3+(figuras b), com exceção do Ti que só foi calculado no estado de oxidação 3+.

Em seguida foi feita novamente a otimização das estruturas anteriores só que com o método *ab initio*, na base 6-31G e foram obtidos as seguintes estruturas:

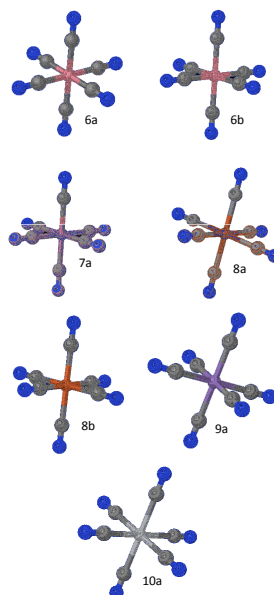


Tabela 1: Comprimento das ligações entre os metais e os cianetos

Metal (M <sup>III</sup> )	Distância M-CN (Å)		
	PM3	6-31G	Exp.
Co <sup>2+</sup>	1,915 - 1,926	1,91 - 1,93	-
Co <sup>3+</sup>	1,915	2,05	1,8827
Cr <sup>2+</sup>	2,029 - 2,038	-	-
Cr <sup>3+</sup>	2,004 - 2,023	2,2	2,0695
Fe <sup>2+</sup>	1,911	2,33	1,875 - 1,892
Fe <sup>3+</sup>	1,891 - 1,918	2,1	1,9271
Mn <sup>2+</sup>	1,957 - 1,979	-	1,929 - 1,983
Mn <sup>3+</sup>	2,001 - 2,009	2,15	1,9766
Ti <sup>3+</sup>	2,249 - 2,259	2,31 - 2,32	-

Tabela 2: Grupo pontual dos complexos

Metal (M <sup>III</sup> )	Grupo Pontual		
	PM3	6-31G	Exp.
Co <sup>2+</sup>	D <sub>2h</sub>	D <sub>2h</sub>	-
Co <sup>3+</sup>	O <sub>h</sub>	O <sub>h</sub>	O <sub>h</sub>
Cr <sup>2+</sup>	D <sub>2h</sub>	-	-
Cr <sup>3+</sup>	C <sub>2h</sub>	O <sub>h</sub>	O <sub>h</sub>
Fe <sup>2+</sup>	O <sub>h</sub>	O <sub>h</sub>	C <sub>2h</sub>
Fe <sup>3+</sup>	D <sub>2h</sub>	O <sub>h</sub>	O <sub>h</sub>
Mn <sup>2+</sup>	C <sub>2h</sub>	-	C <sub>2h</sub>
Mn <sup>3+</sup>	C <sub>2h</sub>	O <sub>h</sub>	O <sub>h</sub>
Ti <sup>3+</sup>	C <sub>2h</sub>	D <sub>2h</sub>	-

### CONCLUSÃO

Vendo os resultados experimentais e comparando-os com os resultados teóricos vemos que eles são próximos e isso indica que podemos utilizar cálculos teóricos para sabermos qual será o grupo pontual e quais serão os comprimentos de ligações dos complexos que iremos estudar. E também podemos ver quais os métodos que realizam as melhores aproximações.

Nas figuras acima temos o Co (2+ e 3+), Cr (3+), Fe (2+ e 3+), Mn (3+) e Ti (3+), respectivamente. As estruturas que estão faltando não convergiram corretamente.

As tabelas 1 e 2 mostram uma comparação dos comprimentos das ligações entre os metais e os cianetos experimentalmente e o calculado com os métodos especificados, e mostram quais os grupos pontuais de cada complexo, respectivamente.