

# CÁLCULO DO ESPECTRO DE ABSORÇÃO DA SÍNTESE E ANÁLISE ESTRUTURAL DE COMPLEXOS DE RÓDIO (I) CONTENDO ALIL E CIANOALQUILFOSFINAS.

Congresso Online Nacional De Química Analítica E Ambiental., 1ª edição, de 26/10/2020 a 30/10/2020  
ISBN dos Anais: 978-65-86861-45-7

MORAIS; JEFFERSON LORENÇONI DE<sup>1</sup>, SILVA; JOÃO ANTÔNIO GONÇALVES E<sup>2</sup>, VALVERDE; CLODOALDO<sup>3</sup>, SHARMA; VIKAS MAHENDRA<sup>4</sup>, LOPES; YAGO FRANCISCO<sup>5</sup>, SOUSA; WILKER CÁSSIO<sup>6</sup>

## RESUMO

Uma série de compostos de acetilacetato - carbonil - ródio, substituídos por fosfinas funcionalizadas, foi preparada com bons a excelentes rendimentos pela reação de  $[Rh(acac)(CO)_2]$  (acac é acetilacetato) com o alil-, cianometil- ou correspondentes fosfinas substituídas com cianoetil. A Fosfina tem um nome comum conhecido popularmente como hidreto de fósforo (PH<sub>3</sub>), também conhecido como Fosfano e, eventualmente de Fosfamina. Ela possui características de um gás incolor inflamável em uma temperatura de ebulição de -88°C. Possuindo as características de geometria piramidal trigonal com simetria molecular C<sub>3v</sub> e contém uma massa molar 33,997 g/mol. A Fosfina tem aplicação na agricultura, servindo como um tratamento de expurgo e contra pragas em lavouras e principalmente na plantação de milho, feijão e aplicação de armazenamento de grãos. Também possui aplicações na medicina em tratamentos como anti- tumoral, anticâncer, anti-diabetes. Apresenta grande potencial de inovação tecnológica médica e agroindustrial com aplicações em produtos e serviços que apresentam responsabilidade socioambiental. Sendo assim os cálculos foram feitos com o pacote Software Gaussian 09 e otimizados na faixa ultravioleta visível pelo método DFT (Teoria do Funcional da Densidade) com o funcional CAM/B3LYP, e na base 6-311+G,(d,p) onde foi possível ver as interações de transição ocorrendo em seus correspondentes receptores e doadores de elétrons, e através dos cálculos de absorção, conseguimos ver as transições com maior nível de excitação, os pontos que mais absorvem e os pontos que não apresenta troca de energia. Também foi utilizado dados teóricos e experimental para verificar a severidade dos dados para sua coesão final, e assim conseguimos compreender o funcionamento de cada interação e possível estudo de desenvolvimento de um novo fármaco para aplicação na saúde ou produto agroecológico.

**PALAVRAS-CHAVE:** Fosfina, Geometria Molecular, Cálculos do Espectro de Absorção, DFT.

<sup>1</sup> UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, lorenconi12112009@hotmail.com

<sup>2</sup> Instituto Federal de Goiás - Campus: Rio Verde, joao.antonioigs@hotmail.com

<sup>3</sup> Universidade Paulista - UNIP, valverde@ueg.br

<sup>4</sup> Kavayitri Bahinabai Chaudhari North Maharashtra University, vikaschemicalscience@gmail.com

<sup>5</sup> Jalgaon, yagolopes-f@hotmail.com

<sup>6</sup> India, eng.wilker@yahoo.com