



## SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2016
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Influência dos óxidos de fosfinas na estabilização de nanopartículas metálicas
<b>Autor</b>	CAMILA ISERHARDT DA SILVA
<b>Orientador</b>	MAXIMILIANO SEGALA

## Influência dos óxidos de fosfinas na estabilização de nanopartículas metálicas

Autor: Camila Iserhardt da Silva e Orientador: Maximiliano Segala

Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Piet van Leeuwen et al. publicou recentemente um estudo sobre a utilização de fosfinas secundárias para a estabilização de nanopartículas de Ru [1] e Au [2]. Como as propriedades óticas e eletrônicas de clusters metálicos são determinadas pelo tamanho, é importante entender como estas mudam no regime de tamanhos diminutos, desta forma, estudamos a natureza das interações existentes entre as fosfinas secundárias [1] com nanopartículas de prata [3] e ouro [2].

Os complexos de Ag e Au foram otimizados utilizando a Teoria do Funcional de Densidade (DFT) nos programas Orca [4] e Gaussian09 [5]. Utilizamos os funcionais de troca-correção BP86 e a função de base Def2TZVP. E no Orca foi utilizado também a correção relativística ZORA e termos de dispersão de Grimme. As frequências vibracionais foram calculadas para caracterizar cada estado, desta forma os estados de transição apresentaram uma frequência imaginária e os estados fundamentais nenhuma.

Estudou-se a clivagem heterolítica do H<sub>2</sub> de acordo com o esquema 1 em das referências [1,2]. Duas aproximações do H<sub>2</sub> foram analisadas: a aproximação do H<sub>2</sub> pelo oxigênio e a aproximação do H<sub>2</sub> pelo metal. Cálculos demonstraram que a aproximação do H<sub>2</sub> pelo metal é mais estável do que a aproximação do H<sub>2</sub> pelo oxigênio. Quando o metal ligado ao complexo é Ag, a aproximação é cerca de 2,3 kcal/mol mais estável, quando o metal é Au a diferença é de 3,5 kcal/mol.

Estudou-se também as distâncias interatômicas de 4 diferentes estruturas e seus respectivos estados de transição (estruturas baseadas no esquema 1 [1,2], tendo como metal Ag ou Au), sendo observado que em todas elas as distâncias entre o metal e o P são maiores quando o metal é a Ag. As distâncias entre todos os outros átomos não apresentaram um comportamento sistemático, com a análise de uma distância específica hora sendo maior com Ag e menor com o Au. Comportamento semelhante é observado para os ângulos de ligação.

Apesar da diferença energética e valores geométricos, as estruturas contendo Au apresentam as mesmas tendências na variação de energia e dados geométricos quando se troca os ligantes do que suas correspondentes com Ag. Mais estudos são necessários para caracterizar os mecanismos de reação tanto tendo o Au como o Ag como metais.

[1] Eoin Rafter, Torsten Gutmann, Florian Löw, Gerd Buntkowsky, Karine Philippot, Bruno Chaudret e Piet W. N. M. van Leeuwen. *Catal. Sci. Technol.* 2013, 3, 595. [2] Israel Cano, Miguel A. Huertos, Andrew M. Chapman, Gerd Buntkowsky, Torsten Gutmann, Pedro B. Groszewicz, and Piet W. N. M. van Leeuwen. *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137, 7718. [3] Anil Desireddy, Brian E. Conn, Jingshu Guo, Bokwon Yoon, Robert N. Barnett, Bradley M. Monahan, Kristin Kirschbaum, Wendell P. Griffith, Robert L. Whetten, Uzi Landman e Terry P. Bigioni. *Nature* 2013, 501, 399. [4] F. Neese, *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.*, 2012, 73. [5] Gaussian 09, Revision D.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.

Pesquisa desenvolvida junto ao Centro Nacional de Supercomputação da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.