



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2015
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Influência dos óxidos de fosfinas na estabilização de nanopartículas de prata
<b>Autor</b>	CAMILA ISERHARDT DA SILVA
<b>Orientador</b>	MAXIMILIANO SEGALA

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

Autor: Camila Iserhardt da Silva e Orientador: Maximiliano Segala

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

Metais cunháveis como o Cu, a Ag e o Au são conhecidos por serem quimicamente inertes; entretanto, nos anos 70, o grupo do Prof. Parravano reportou a atividade de compostos de Au na reação de transferência oxigênio/hidrogênio e na redução de NO por hidrogênio [1]. Sabe-se atualmente que esta reatividade do Au é devido a nanopartículas menores que 2 nm. Apesar dos compostos de Au serem extensamente estudados, há ainda poucos trabalhos com Ag, sendo um deles o publicado pelo Bigioni et al. [2] no qual o  $M_4Ag_{44}(p-MBA)_{30}$  é descrito, sendo M um metal alcalino. Professor Piet van Leeuwen publicou recentemente [3] um estudo sobre a utilização de fosfinas secundárias para a estabilização de nanopartículas de Ru. Como as propriedades óticas e eletrônicas de clusters metálicos são determinadas pelo tamanho, é importante entender como estas mudam no regime de tamanhos diminutos, sendo que neste trabalho estudamos a interação de fosfinas secundárias [3] com nanopartículas de prata [2] com o objetivo de descrever a natureza das interações existentes entre elas como fizemos recentemente para complexos trinucleares de Cu, Ag e Au [4].

Geometrias foram otimizadas com a Teoria do Funcional de Densidade (DFT) utilizando-se o funcional de troca-correção BP86 em conjunto com correção de dispersão par-a-par de Grimme, correção relativística ZORA e uma base triple-zeta de Ahlrichs nos programas Orca [5] e Gaussian [6].

Estudando-se o equilíbrio tautomérico do composto POHPh<sub>2</sub> no qual o H pode estar ligado tanto ao P (Estrutura **1**) como ao O (Estrutura **2**), observa-se que o **1** é 0,004084 H (cerca de 2,56 kcal/mol) mais estável que **2**, o que está de acordo com o reportado experimentalmente. Apesar disso é atribuída a Estrutura **2** a complexação com a Ag produzindo a Estrutura **3** (Esquema **1** em [3]). A energia total da Estrutura **3** é de -1908,03758313 H a qual é 0,0602806 H (cerca de 37,83 kcal/mol) mais estável que a soma dos fragmentos que a compõe, demonstrando assim a estabilidade resultante da interação entre os ligantes fosfinas e o átomo de Ag. Estudos da interação entre a nanopartícula de Ag reportada em [2] e ligantes fosfinas estão em curso. Para tanto utilizaremos a técnica de análise de decomposição de energia (EDA) para avaliar as interações entre os fragmentos ligados de forma semelhante ao realizado em [4].

[1] M.-C. Daniel e D. Astruc, *Chem. Rev.* 2004, 104, 293.

[2] 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.

[3] 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.

[4] Giovanni F. Caramori, Rafael M. Piccoli, Maximiliano Segala, Alvaro Muñoz-Castro, Raul Guajardo-Maturana, Diego M. Andrada e Gernot Frenkinge. *Dalton Trans.*, 2015, 44, 377.

[5] F. Neese, *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.*, 2012, 73.

[6] 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.