

RESUMO SIMPLES - CEXA - CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA

**MODELAGEM COMPUTACIONAL DE REAÇÕES DE CIANOSILILAÇÃO
PROMOVIDAS POR COMPOSTOS DE LANTANÍDEOS COM LIGANTES
DITIOCARBAMATOS**

Aparecida Natália Da Silva (aparecida.natalia@ufpe.br)

William Daniel Alves Bezerra Da Silva (williamdaniel212@gmail.com)

Juliana Angeiras Batista Da Silva (juliana.bsilva@ufpe.br)

Resumo COBICET 2026

Motivados pela escassez de dados experimentais e teóricos que expliquem os efeitos catalíticos de compostos de Ln^{3+} em reações de cianosililação, o objetivo principal deste trabalho foi avaliar o desempenho de funcionais DFT na obtenção da geometria de complexos de Eu(III) com ligantes ditiocarbamatos, para que auxiliasse na proposição de intermediários que auxiliem na proposição dos mecanismos de reação envolvidos na catálise promovida por tais compostos. Os complexos selecionados a partir de dados da literatura foram: $[\text{Eu}(\text{dtc})_3(\text{dmbipy})]$, $[\text{Eu}(\text{Me}_2\text{dtc})_3(\text{bpy})]$, $[\text{Eu}(\text{S-ProOHdtc})_3(\text{phen})]$, $[\text{Eu}(\text{S}_2\text{CNH}_2)_4]$ e $[\text{Eu}(\text{Me}_2\text{dtc})_3(\text{phen})]$, em que dtc = dietilditiocarbamato, S-ProOHdtc = (S)-prolinol- (S-proOH), dmbipy = 4,4'-dimetil-2,2'-bipiridina, bpy =

2,2'-bipiridina, phen = 1,10-fenantrolina. Para isso, foram testados os funcionais DFT B3LYP, PBE1PBE e M06-2X. Para os átomos de Európio foram empregados potenciais efetivos de caroço (Effective Core Potentials – ECP) e conjuntos de funções de base do tipo MWB52, em que 52 elétrons do íon Eu(III) são tratados implicitamente, incluindo os elétrons da subcamada 4f; e conjuntos de funções de base do tipo 6-31+G(d) para os outros átomos. Comparação com as respectivas estruturas cristalográficas das distâncias de ligação e do desvio quadrático médio das posições atômicas (Root Mean Square Deviation – RMSD) obtidas a partir das estruturas calculadas mostram que os valores de RMSD obtidos permaneceram abaixo de 1 Å, indicando que as geometrias otimizadas apresentam elevada similaridade com as estruturas iniciais (cristalográficas). Esses resultados sugerem que os funcionais empregados foram capazes de descrever adequadamente a coordenação do íon Eu(III) e a disposição espacial dos ligantes nesses sistemas. Vale ressaltar que quando tal análise é realizada para as estruturas excluindo-se os átomos de H, os valores de RMSD obtidos foram ainda mais baixos, o que é esperado devido à incerteza experimental na determinação da posição desses átomos. As distâncias de ligação dos átomos ligantes para o íon Eu(III) também foram obtidas com desvios menores que 0,06 Å e 0,07 Å, respectivamente para as distâncias Eu–S e Eu–N. De maneira geral, o funcional B3LYP obteve o melhor desempenho dentre os funcionais avaliados para os compostos investigados. Espera-se que este estudo de modelagem computacional possa auxiliar no andamento de projetos que envolvam a elucidação do mecanismo reacional e otimização do processo catalítico.

Autores:

Aparecida Natalia Da Silva, William Daniel Alves Bezerra da Silva e Juliana Angeiras Batista da Silva

aparecida.natalia@ufpe.br, williamdaniel212@gmail.com, juliana.bsilva@ufpe.br

Palavras-chave: modelagem computacional; dft; catálise; lantanídeos; ditiocarbamatos.

