



XXIX CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA (CIC)

2019

UACSA, UAST, UFAPE, CODAI e UEADTEC

Universidade Federal Rural de Pernambuco

Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação

Coordenação de Programas Especiais



AVALIAÇÃO DO PRODUTO PÚRPURA DE RUHEMAN NA PRESENÇA DE ÍONS LANTANÍDEOS

Jhulie Alexandre de Oliveira, Eduardo de Castro Aguiar

E-mail: jhuliealexandre@gmail.com

Universidade Federal Rural de Pernambuco/Unidade Acadêmica de Serra Talhada

A ninidrina é um composto que, reagindo com aminoácidos presentes no suor humano, produz o Púrpura de Ruhemann (RP), composto responsável pela revelação de impressões digitais latentes (IDL). A literatura reporta melhor fotoluminescência do RP com a complexação, especialmente a íons lantanídeos, devido a estreita e intensa faixa de emissão destes metais, permitindo melhor sensibilidade e contraste para a imagem. Neste sentido, este trabalho objetiva a realização de estudos computacionais de complexos Tb-RP, para de contribuir com o entendimento deste sistema de interesse forense. Os ligantes e complexos foram otimizados com os funcionais wB97X-D3 e B3LYP em conjunto com as funções de base def2-TZVP e o EPC MWB54 para o Tb(III), em fase gás e com solvente implícito (MeOH) pelo modelo CPCM no programa Orca 4.0.1. Foram considerados os complexos possíveis em uma solução aquosa de RP e TbCl₃ com número de coordenação 8. As energias de complexação (ΔE) foram contabilizadas a partir da subtração da energia do complexo, menos o somatório da energia do metal com a dos ligantes. Seis complexos foram analisados: [TbRP₂Cl₂]⁻¹, [TbRP₂Cl(OH₂)] e [TbRP₂(OH₂)₂]⁺¹, considerando isômeros *cis* e *trans*. A ordem de estabilidade obtida foi [TbRP₂Cl₂]⁻¹ > [TbRP₂Cl(OH₂)] > [TbRP₂(OH₂)₂]⁺¹, apresentando ΔE relativas entre 0 e 594,08 kJ·mol⁻¹, assim como na literatura, os ligantes *cloro*, por terem caráter aniônico conferem mais estabilidade aos complexos. Entre os complexos, aqueles com isomeria *cis* foram mais estáveis que os *trans*, devido a repulsões estéricas dos ligantes RP nesta conformação. A solvatação proporcionou maior estabilização, apresentando ΔE relativas entre 0 e 129,68 kJ·mol⁻¹, com a mesma ordem de estabilidade observada no vácuo. A solvatação também se mostrou importante para a obtenção da geometria do composto *trans*-[TbRP₂(OH₂)₂]⁺¹, que na otimização se convertia no isômero *cis*. Os valores obtidos com o wB97X-D3 se mostraram mais negativos que os obtidos com B3LYP, pois o primeiro considera interações de dispersão desprezadas pelo segundo. Os complexos com mais ligantes *cloro* mostraram-se mais estáveis que os demais, e os isômeros *cis* mais estáveis que os *trans*. O efeito do solvente mostrou-se importante para a estabilização. O wB97X-D3 resultou em maiores energias de complexação.

Palavras-chave: Complexos de térbio, Púrpura de Ruhemann, Solvatação implícita, DFT.

Área do Conhecimento: Ciências Exatas e da Terra.

Realização:



Apoio:



FUNDAÇÃO APOLÔNIO SALLES
F A D U R P E