



E0525

MODELAGEM MOLECULAR DE CIANOMETALATOS

Willian Francisco Cordeiro Dantas e Prof. Dr. André Luiz Barboza Formiga (Orientador),
Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O uso de métodos computacionais tem grande importância na química quântica, pois a partir deles podemos determinar propriedades qualitativas e quantitativas das moléculas que estão sendo estudadas. Neste trabalho visamos estudar sistematicamente os métodos computacionais à disposição na descrição das geometrias e propriedades dos hexacianometalatos da primeira série de transição em diversos estados de oxidação. Para esse fim, métodos semiempíricos e *ab initio* serão empregados e os resultados serão confrontados com dados experimentais disponíveis na literatura, e a partir desses resultados poderemos saber qual o melhor método computacional que pode ser utilizado para o cálculo das propriedades destes compostos.

Cianometalatos - Modelagem molecular - Química de coordenação