

Título	Abordagem computacional sobre a química ácido-base dos precursores dos óxidos moleculares do grupo 6 (Cr,Mo,W).
Resumo	<p>Óxidos moleculares de metais de transição têm dado uma importante contribuição a disciplinas tão diversas como a química, matemática e a medicina desde a sua descoberta nos primórdios do século XIX por Berzelius (<i>Poggendorff's Ann. Phys. Chem.</i>, 1826, 6, 369). De novas arquiteturas geométricas a actividade anti-retroviral estas espécies denominadas polioxometalatos têm tido um particular destaque na literatura científica do século passado pelo leque alargado de aplicações inesperadas.</p> <p>No entanto só recentemente se começaram a analisar as reacções de condensação em solução aquosa que dão lugar a estes agregados polinucleares. O desconhecimento de informação estrutural sobre as espécies que dão origem a óxidos aniónicos polinucleares típicos do grupo 6 (polimolibdatos, tungstatos, etc.) é um factor impeditivo para estabelecer uma generalização mecanística da agregação destes mono-metalatos. A utilização da química computacional poderá ser o factor chave que permitirá dar uma visão estrutural mais clara a todo o processo.</p> <p>O mestrando irá aprender a utilizar as mais recentes técnicas computacionais baseadas em métodos de funcional de densidade (DFT) e funções de onda [CCSD(T)] com vista a iniciar um projecto colaborativo com parceiros internacionais sobre o rastreio de isómeros de mono-metalatos em diferentes ambientes de coordenação e estados de protonação.</p> <p>O objectivo será o de fornecer estes dados estruturais com optimizações de geometria por primeiros princípios, assim como avançar com valores de energia de inter-conversão entre os vários isómeros das espécies de tipo <math>[MO_x(OH)_y(H_2O)_z]^{n+}</math> (M=Cr,Mo,W) e tentar reproduzir as afinidades de protonação destas espécies que serão comparadas com as da literatura existente.</p>
Local de trabalho	C8, Campus de Ciências
Orientador (es)	Nuno A. G. Bandeira, Maria José Calhorda
Informações	