DFT: B3LYP-6/31G, Estrutura e Análise Vibracional do Complexo de Ni(II), ácido guanidoacético e serina.

Judith Felcman (PQ)[1*], Joanna Maria Ramos (PG)[2], Otávio Versiane[1,3] (PQ), Claudio Tellez[2] (PQ), Marta Cristina Sousa (IC)[1]

[1]*Departamento de Química – PUC-Rio – Rua Marquês de São Vicente, 225 – 22453-900 Rio de Janeiro - RJ.*
felcman@rdc.puc-rio.br
[2] *Departamento de Química Inorgânica – UFF- Morro do Valonguinho S/N, Niterói*

[3] *CEFETEQ – Rua Lucio Tavares, 1045 –26530-060 Nilópolis – RJ.*

Palavras Chave: *Espectro infravermelho, guanidoacético-Serina-Ni(II), DFT:B3LYP/6-31G*

Introdução

O complexo de Ni(II), ácido guanidoacético (Gaa) e serina (Ser) foi sintetizado seguindo a descrição de Versiane[1]. A partir do espectro FT-IV nas regiões entre 4000-370 cm^{-1} e entre 700 – 30 cm^{-1}, determinou-se a 2ª. derivada do espectro total e realizou-se a análise de deconvolução de bandas, com o intuito de obter o maior número de bandas fundamentais que caracterizam os 3N-6 = 78 modos normais. A análise vibracional realizou-se tendo como base dois critérios fundamentais: 1) Comparativo; uso de freqüências de grupos e de ligações químicas características. 2) Mediante o uso da Teoria do Funcional da Densidade (DFT)[2], com funções híbridas B3LYP com base 6-31G. A estrutura e os parâmetros geométricos também foram determinados.

Resultados e Discussão

Tanto da análise do espectro FT-IV, quanto dos resultados estruturais obtidos pelo procedimento DFT: B3LYP/6-31G, se evidencia que o Ni (II) está coordenado através de dois átomos de O e dois átomos de N em posições trans. O esqueleto estrutural $Ni(O_2)(N_2)$ apresenta planaridade. A estrutura do complexo se apresenta na Figura 1.

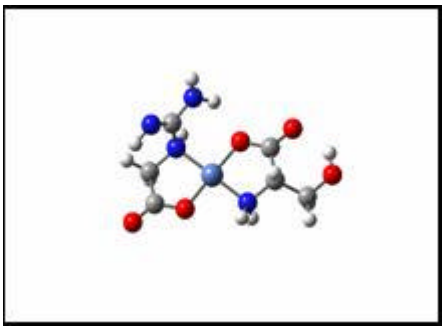

Figura 1 – Complexo Ni(II)GaaSer

A Tabela 1 apresenta alguns dos parâmetros geométricos mais significativos do esqueleto estrutural. A partir da análise vibracional, pode-se verificar que os modos normais que envolvem as interações entre o metal e os átomos diretamente ligados a ele, não são modos normais puros de estiramento Ni-N, Ni-O, como também os de variações angulares, existindo forte grau de acoplamento. O estudo proposto visa a análise rigorosa da caracterização dos modos normais através da análise da forma destes, ou em outras palavras, das estruturas geométricas de não equilíbrio que caracterizam cada modo normal. Na Tabela 2 apresenta-se alguns números de onda característicos do complexo e a atribuição vibracional deles.

Tabela 1. Parâmetros geométricos do cerne do complexo GAASerNi(II).

Dist. Å	Ni-O(2)	Ni-O(15)	Ni-N(12)	Ni-N(16)
	1.899	1.822	1.909	1.929
Ang	N(16)NiO(2}	N(16)NiO(15)	O(15)NiN(12)	N(12)NiO(2)
	93,270	88,194	91,556	86,990

Tabela 2. Números de onda selecionados para o esqueleto estrutural do complexo GAASerNi(II) e atribuição vibracional aproximada.

DFT:B3LYP. Calc.	FT-IV exp	Atribuição aproximada
579	574	ν(NiN) + δ(CNNi)
508	485	ν(NiN) +δ(NH_2)
332	323	ν(NiO) + δ(ONiO)

Conclusões

Determinou-se a estrutura geométrica do complexo Ni(II)Gaa Ser, evidenciando-se a posição trans para os átomos de O e N diretamente ligados ao Ni. Os parâmetros geométricos são concordantes com aqueles de outras estruturas similares de complexos de Ni (II). A atribuição vibracional revelou forte grau de acoplamento para os modos Metal-Ligante.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pelo suporte financeiro.

[1] Versiane, O. C., *Tese Doutorado . Puc-Rio.* ***2005***

[2] Foresman J. B., Frisch Æ. : "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods"., 2d. ed. Gaussian Inc., Pittsburgh, PA. 1998.