

# Estudo espectroscópico vibracional e determinação estrutural do complexo trans-bis- (glicina) níquel II, [Ni(Gli)<sub>2</sub>]

Joanna M<sup>a</sup> Ramos (PG)<sup>1\*</sup>, Otávio Versiane (PQ)<sup>2</sup>, Judith Felcman (PQ)<sup>1</sup>, Claudio A.T. Soto (PQ)<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química- PUC-Rio – Rua Marquês de São Vicente,225 – Gávea – Rio de Janeiro, [joannamaria@uol.com.br](mailto:joannamaria@uol.com.br)

<sup>2</sup> Centro Federal de Educação Tecnológica de Química de Nilópolis (CEFETEQ) – Rio de Janeiro

<sup>3</sup> Departamento de Química Inorgânica – UFF – Morro do Valonguinho s/n – Centro – Niterói – RJ

Palavras Chave: Espectroscopia vibracional, determinação estrutural, [Ni(Gli)<sub>2</sub>], bases: DFT:B3LYP/6-31G e 6-311G, e RHF:6-311G

## Introdução

O espectro infravermelho de complexos metal-glicina foi objeto de estudo de muitos pesquisadores, originando excelente monografias.<sup>1</sup>

Atualmente, com modernos espectrofotômetros podemos obter espectros no infravermelho com ótima resolução, além de recursos computacionais que nos permitem a obtenção da segunda derivada e a análise de deconvolução de bandas espectrais.

## Resultados e Discussão

O espectro FT-IR do complexo [Ni(Gli)<sub>2</sub>] foi registrado em um espectrofotômetro Perkin Elmer 2000, com resolução de 4cm<sup>-1</sup> (figura 1), onde foram obtidos espectros na região de alta e de baixa energia (com pastilhas de KBr e de polietileno, respectivamente). A otimização dos parâmetros geométricos foi feita aplicando-se o método do DFT com as bases B3LYP/6-31G e 6-311G, além de RHF:6-311G. A energia de estabilização para B3LYP/6-311G foi de -2075,7277591 A.U. Para uma atribuição vibracional mais apurada, os valores obtidos pelo DFT foram corrigidos pelo fator 0,9613; outros recursos como deconvolução de bandas e PDPG (Porcentagem de Desvio de Parâmetros Geométricos) também foram utilizados. A PDPG pode ser normalizada para obter a porcentagem de participação de cada coordenada vibracional interna que descreve a forma do modo normal.

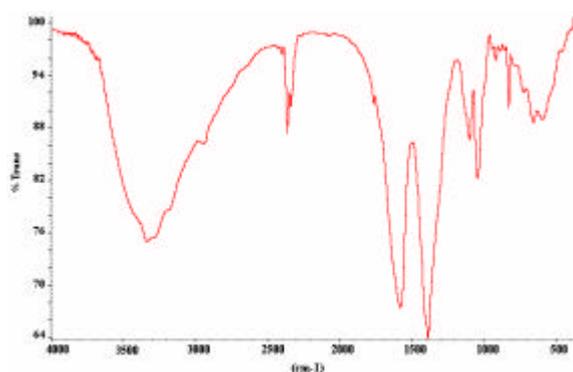


Figura 1. Espectro infravermelho do complexo [Ni(Gli)<sub>2</sub>] na região de 4000 – 500 cm<sup>-1</sup>

30<sup>o</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Tabela 1. Atribuição vibracional para o complexo [Ni(Gli)<sub>2</sub>], números de onda em cm<sup>-1</sup>.

DFT:B3LYP/6-31G	DFT X 0,9613	2 <sup>a</sup> der.	Atribuição aproximada, % de desvio (PDPG)
556	515	522	? <sub>as</sub> (NiN) 35,7% + d(NiNC) 13%
479	460	450	d(CC=O) 59% + ? <sub>s</sub> (NiN) 19,2%
457	439	405	? <sub>as</sub> (NiO) 33% + d(CC=O) 23%
377	362	346	? <sub>s</sub> (NiO) 8,6% + d(CC=O) 76%

Devido a uma mistura de diferentes coordenadas internas para a descrição de um modo normal, a atribuição clara e precisa das vibrações metal-ligante é dificultada. Nesse contexto, nosso propósito é a aplicação da PDPG (como mostra a tabela 1), auxiliada por outros métodos para verificar a participação de cada coordenada interna constituinte de um modo normal.<sup>2</sup>

Através de métodos semi-empíricos e programas computacionais conseguimos propor a estrutura mais adequada e estável, bem como uma atribuição vibracional mais precisa.

## Conclusões

A análise estrutural teórica obtida através do procedimento DFT mostrou que a estrutura mais provável e estável para o complexo em estudo é a posição trans da glicina, ao redor do átomo central de Ni, formando uma estrutura quadrado plana.

## Agradecimentos

J.M.Ramos, C.A.T. Soto e J.Felcman agradecem ao CNPq pelas bolsas concedidas.

<sup>1</sup> Nakamoto, K, Infrared and Raman Spectra of inorganic and coordination compounds. **1986**.

<sup>2</sup> C.A.TélezS.; E.Hollauer; M.A.Mondragón; V.M.Castaño, *Spectrochim Acta* **60**, **2004**, 2171.