

DFT: B3LYP/6-311G (d, p): Geometria estrutural e análise espectroscópica vibracional do complexo aspartato – guanidoacetato de níquel (II), [Ni(Asp)(Gaa)].

Joanna M^a. Ramos (PG)^{1*}, Otávio Versiane (PQ)², Judith Felcman (PQ)¹, Cláudio A. T. Soto (PQ)³, Carneiro, J. W. M. (PQ)³, Cruz, M. T. M. (PQ)³

¹Departamento de Química PUC – Rio. Rua Marquês de S. Vicente 225, Gávea. Rio de Janeiro.

joannamaria@uol.com.br

²Centro Federal de Educação Tecnológica de Química de Nilópolis (CEFETEQ)- Rio de Janeiro.

³Departamento de Química Inorgânica – UFF – Morro do Valonguinho s/n Niterói – Centro. RJ
Espectroscopia vibracional. Aspartato – guanidoacetato níquel (II). DFT:B3LYP/6-311G(d, p).

Introdução

O estudo de complexos metálicos com ligantes biológicos nos permite entender os processos que acontecem nos sistemas vivos. Com base nisso, estudamos a formação do complexo ternário de Ni(II) com os ligantes ácidos aspártico e guanidoacético. Neste trabalho é feito a análise estrutural e a caracterização espectroscópica no infravermelho do complexo [Ni(Asp)(Gaa)] através do procedimento mecânico-quântico DFT. Reforçamos essa análise com o estudo rigoroso das geometrias distorcidas dos modos normais, somado à deconvolução de bandas e ao espectro da segunda derivada^{1,2}.

Resultados e Discussão

A estrutura do complexo, (Figura 1) se obteve através do procedimento DFT:B3LYP/6-311G(d,p), obtendo uma energia igual a: $E=(RB+HF-LYP)$ -2452.6846132 a.u. O espectro IV teórico calculado concorda com o experimental (Figura 2). As distâncias calculadas para as ligações do níquel foram: $d(Ni-N) = 1,978 \text{ \AA}$ e $1.921 \text{ \AA}$; $d(Ni-O) = 1.824 \text{ \AA}$, e $1.863 \text{ \AA}$. Com relação à atribuição vibracional, se encontra uma elevada mistura entre as coordenadas internas que definem os modos normais, por exemplo: a banda IV em 564 cm^{-1} se atribui à mistura $p(NiN)17\% + \delta(OC=O)9\%$. A banda em 507 cm^{-1} se atribui como: $\delta(NiN)13\% + \delta(OCC)12\% + p(NiN)13\%$. A banda em 443 cm^{-1} se descreve como: $p(NiO) 11\% + \delta(OC=O)7\%$. A banda aos 399 cm^{-1} se atribui como: $p(NiN)17\% + \delta(O=CC)8\%$.

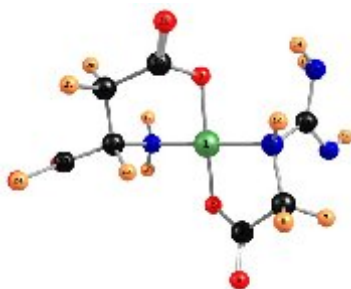


Figura 1. Geometria estrutural do complexo [Ni(Asp)(Gaa)].

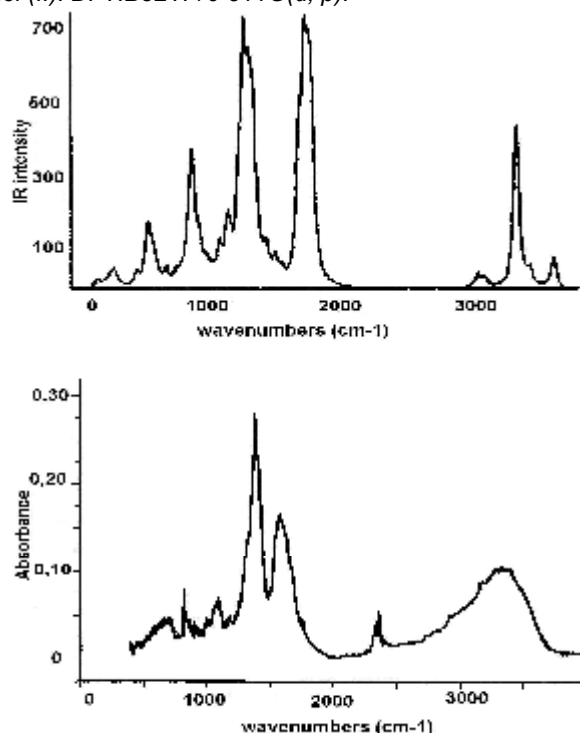


Figura 2. Espectro IV experimental (superior) e o calculado para o complexo [Ni(Asp)(Gaa)].

Conclusões

O espectro teórico concorda no posicionamento das bandas com o espectro experimental, corroborando assim a geometria estrutural proposta para o complexo. Se realizou uma análise vibracional rigorosa para os modos metal – ligante, através do estudo das geometrias distorcidas de cada modo normal do esqueleto estrutural.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq pelas bolsas concedidas.

¹ Ramos, J.M.; Versiane, O.; Felcman, J.; Soto, C.A.T. *Spectrochim. Acta A.* **2007**, 67(3,4) 1037.

² Ramos, J. M.; Versiane, O.; Felcman, J.; Soto, C.A. T. *Spectrochim. Acta A.* **2009**, 72, 182.