

## Estudo do efeito da dopagem com íons cobre em cristais do complexo $Zn(L\text{-prolina})_2Cl_2$

\*Carolina Guimarães de Souza<sup>1</sup> (IC), Jesiel Freitas Carvalho<sup>2</sup> (PQ), Ricardo Costa de Santana<sup>2</sup> (PQ)

\*carolguimaraes4@hotmail.com

<sup>1</sup> Instituto de Química - Universidade Federal de Goiás – Goiânia (GO) - Brasil.

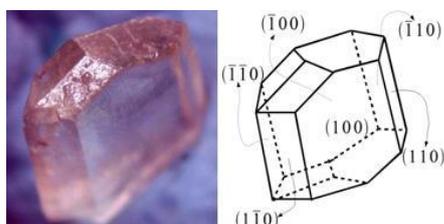
<sup>2</sup> Instituto de Física - Universidade Federal de Goiás – Goiânia (GO) - Brasil.

Palavras Chave: RPE, aminoácidos, metal de transição.

### Introdução

Complexos metálicos de aminoácidos e peptídeos são o modelo ideal para o estudo de íons metálicos em proteínas. Em complexos paramagnéticos puros as interações dipolar e de troca entre os íons metálicos explicam a maior parte do espectro de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE). A informação sobre a estrutura eletrônica, vibracional e outras interações envolvendo um único centro metálico tem sido obtidas a partir da introdução de íons paramagnéticos como impurezas em complexos isoestruturais diamagnéticos, geralmente o complexo correspondente de Zn. O cobre é um dos metais de transição mais fáceis de serem estudados nestes tipos de sistemas devido à sua alta simplicidade experimental e teórica. Neste trabalho realizamos o crescimento<sup>1</sup>, o estudo da morfologia dos cristais, o RPE do monocristal e da amostra policristalina de  $Cu^{2+}$  inserido como um dopante nos cristais de  $Zn(L\text{-pro})_2Cl_2$  e comparamos os resultados obtidos a estudos anteriormente realizados.<sup>2</sup> Os tensores  $g$  e  $A$  dos íons cobre nos cristais dopados com cobre [ $Zn(L\text{-pro})_2Cl_2:Cu^{2+}$ ] foram determinados a partir do espectro de RPE da amostra policristalina e comparados com os obtidos para outros complexos de Zn.

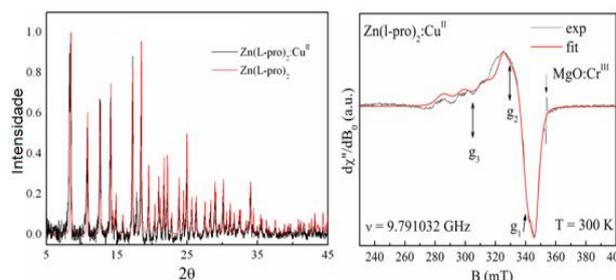
### Resultados e Discussão



**Figura 1.** Fotografia e morfologia de crescimento do cristal de  $Zn(L\text{-Pro})_2Cl_2:Cu^{2+}$

Sendo nítidas as diferenças surgidas entre os hábitos cristalinos dos cristais dopados comparados aos puros, propomos que, de fato, a presença do cobre teve influência na cinética de crescimento das faces naturais dos cristais de  $Zn(L\text{-pro})_2Cl_2$ . Sabe-se que as faces com menor taxa normal de crescimento são as faces que determinam a morfologia do cristal; sendo assim, os resultados deste trabalho indicam que o cobre como impureza

33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química



**Figura 2.** Difratomogramas de raios-X dos complexos  $Zn(L\text{-Pro})_2Cl_2$  e  $Zn(L\text{-Pro})_2Cl_2:Cu^{2+}$  e espectros de RPE do pó do complexo  $Zn(L\text{-Pro})_2Cl_2:Cu^{2+}$ .

inibe a taxa de crescimento normal das faces  $\{110\}$ , fazendo com que elas sejam mais proeminentes nos cristais dopados. O íon  $Cu^{2+}$  ( $3d^9$ ,  $^2D$ ) pode ser tratado como um buraco de configuração  $3d^1$  com spin eletrônico  $S = 3/2$ , e spin nuclear  $I_{Cu} = 3/2$ , para ambos os isótopos naturais de cobre. Os principais valores dos tensores  $g$  e  $A$  indicam que o orbital de mais baixa energia para o elétron desemparelhado é um  $d(x^2-y^2)$ , este orbital é associado ao íon  $Cu(II)$  em uma configuração octaédrica alongada dos ligantes negativamente carregados e é compatível com sistemas similares (Tabela 1). Resultados similares foram encontrados para os sistemas de complexos  $Zn(L\text{-Leu})_2$  e  $Zn(L\text{-Ala})_2$  dopados com cobre. Foram realizadas também medidas de RPE do monocristal, com variação angular nos três planos cristalinos.

### Conclusões

A presença de dopantes em cristais de aminoácidos de fato influencia a cinética de crescimento das faces naturais dos cristais, sendo que a técnica de RPE possibilitou a compreensão da estrutura do complexo formado como sendo o  $Cu(II)$  em uma configuração octaédrica alongada dos ligantes negativamente carregados, sendo compatível com resultados anteriores.

### Agradecimentos

CNPq, Grupo de Física de Materiais-UFG, IQ-UFG.

<sup>1</sup> Y. Yukawa, et al, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **58** (1985) 1591.

<sup>2</sup> RC Santana et al *J. Phys. Chem. Sol.* **67** (2006) 745.