

Atribuição vibracional teórica no infravermelho do complexo [Zn(Gli)(Met)] usando a Teoria do Funcional de Densidade - DFT

Lucas Martins L. Rodrigues (IC)^{1*}, Joanna M^a Ramos (PQ)¹, Lygia Silva de Moraes (IC)¹

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Depto. Química Inorgânica, Av. Athos da Silveira Ramos 149, Bloco A, 6º andar, Rio de Janeiro, RJ, CEP: 21941-909

lmartinsiq@ufrj.br

Palavras Chave: Zn(Gli)(Met), FT-IR, DFT: B3LYP/6-311G (d,p).

Introdução

O estudo de complexos de Zinco-aminoácidos torna-se interessante ao se observar a participação deste metal no metabolismo de proteínas, ácidos nucleicos e carboidratos.¹ Há na literatura trabalhos desenvolvidos com o intuito de estudar a estrutura destes complexos e sua análise espectroscópica vibracional.² O interessante neste trabalho é a comparação da análise espectral teórica, obtida através de cálculos mecânico-quânticos, com a análise experimental, a partir do espectro FT-IR com o objetivo de se obter uma atribuição vibracional do complexo [Zn(Gli)(Met)]. Os dados experimentais coincidem com o modelo teórico proposto.

Resultados e Discussão

O cálculo da geometria estrutural do complexo (figura 1) foi realizado a partir do DFT na base B3LYP/6-311G (d,p). O espectro FT-IR do complexo, apresentado na figura 2, foi registrado em um espectrofotômetro Varian 660 FT-IR com resolução de 4 cm⁻¹ e 80 registros. Os maiores esforços foram concentrados na região de baixa energia do espectro (região metal-ligante), pois esta é de difícil caracterização. Desejando obter uma atribuição mais precisa desta região espectral, foi utilizado o método da PDPG (Porcentagem de Desvio de Parâmetros Geométricos)³.

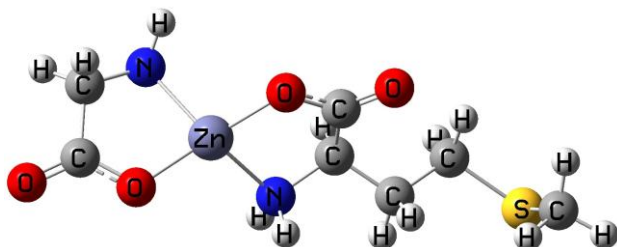


Figura 1. Geometria estrutural do [Zn(Gli)(Met)].

Esta ferramenta fornece a percentagem de participação de cada coordenada interna na atribuição do espectro facilitando a comparação com as bandas do espectro experimental no infravermelho. Na tabela 1 estão representadas algumas atribuições do complexo [Zn(Gli)(Met)]:

Frequência exp/calc. (cm ⁻¹)	Atribuição aproximada
262 / 264	$\delta(\text{NZnO})$ 20% + $\nu(\text{ZnO})$ 20% + $\nu(\text{ZnN})$ 14% + $\delta(\text{ZnNC})$ 9%
296 / 277	$\delta(\text{NZnO})$ 24% + $\nu(\text{ZnN})$ 18% + $\delta(\text{ZnOC})$ 13%
355 / 351	$\delta(\text{NZnO})$ 20% + $\delta(\text{ZnNC})$ 11% + $\nu(\text{ZnO})$ 10%
508 / 494	$\nu(\text{ZnN})$ 29% + $\nu(\text{NC})$ 14% + $\delta(\text{CCO})$ 12% + $\delta(\text{NCC})$ 8%

Tabela 1. Atribuições espectroscópicas do complexo [Zn(Gli)(Met)].

Observa-se também que mesmo na região metal-ligante do espectro há um crescimento da contribuição de atribuições vibracionais envolvendo coordenadas internas, incluindo o carbono, quando a frequência aumenta. Esta tendência já pode ser observada nos seguintes números de onda (calc.): 588 cm⁻¹: $\nu(\text{CC})$ 20% ; 599 cm⁻¹ : $\nu(\text{CC})$ 21% + $\nu(\text{ZnO})$ 18% + $\delta(\text{CCO})$ 9%.

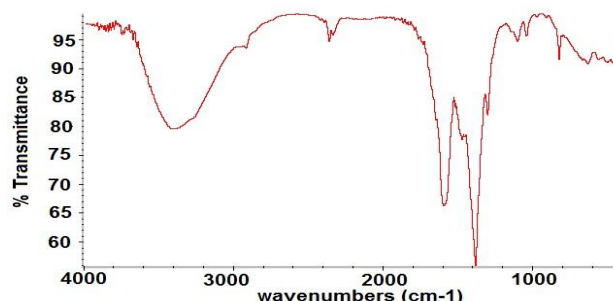


Figura 2. Espectro FT-IR do complexo [Zn(Gli)(Met)].

Conclusões

As atribuições vibracionais feitas a partir de cálculos teóricos apresentam uma boa concordância com o espectro experimental no infravermelho.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Instituto de Química da UFRJ.

¹ Nogueira, D. Cristiane. *Efeito do B, Mo e Zn no conteúdo de proteínas, carboidratos e aminoácidos livres em grãos e sementes de ervilha*. 2008, 4, 35-39.

² Shindo, H., Brown, T.L., *J. Am. Chem. Soc.* 1965, 87, 1904.

³ Ramos, J. M. *Estudo estrutural espectroscópico vibracional de complexos bioinorgânicos metal-aminoácidos, com os metais Zn, Cd e Ni*. 2009, 1, 66-71