

Estudo espectroscópico e análise vibracional no infravermelho e Raman do complexo [Cd(Cis)(Met)].

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: FT-IR, Raman, [Cd(Cis)(Met)].

Introdução

O complexo [Cd(Cis)(Met)] (figura 1) foi sintetizado e posteriormente realizou-se a análise estrutural por meio dos seguintes métodos: determinação do conteúdo de C, H, N, S e O, termogravimetria e por espectroscopia no infravermelho e Raman (figura 2). Este estudo tem o intuito de caracterizar o complexo [Cd(Cis)(Met)], a partir da análise dos espectros infravermelho e Raman (figura 2) na região metal – ligante, auxiliado pelos cálculos mecânico quânticos. Um aspecto interessante é a grande afinidade do cádmio para ligar – se com o enxofre¹, fornecido nesse caso pelo ligante cisteína, motivação esta que levou à escolha desse ligante. A metionina também apresenta um átomo de enxofre em sua cadeia, mas a complexação ocorre pelos átomos de N e O.

Resultados e Discussão

O espectro Raman utilizado foi registrado em um espectrofotômetro Nicolet FT Raman 950, resolução de 4 cm⁻¹ com laser de 9793,64 cm⁻¹; o espectro infravermelho foi obtido em um espectrofotômetro Varian 660 FT-IR com resolução de 4 cm⁻¹ e 80 registros. O cálculo da geometria estrutural do complexo e análise vibracional foi realizado a partir do DFT na base B3LYP/3-21G (6d, 7f). A análise espectroscópica concentrou-se na região de baixa energia (600 – 100 cm⁻¹) visto que essa região é de difícil atribuição, por apresentar um maior acoplamento de coordenadas internas que conformam os modos normais. Para isso, a análise precisa ser realizada de forma a se obter o maior número possível de indícios de que a atribuição espectroscópica aproximada está correta. Em vista disso, o estudo dos espectros Raman e infravermelho com Transformada de Fourier (FT-IR) conseguem propor junto ao cálculo, uma atribuição vibracional mais precisa. Realizadas as devidas comparações entre os números de ondas próximos ou equivalentes, encontrados em ambos os espectros, podemos chegar às seguintes atribuições vibracionais para o complexo: $\nu(\text{CdN}) + \delta(\text{CNCd})$ em 475cm⁻¹(R) / 473cm⁻¹(IV); $\nu(\text{CdN}) + \delta(\text{COCd})$ em 411cm⁻¹(R) / 420cm⁻¹(IV); $\nu(\text{CdO}) + \delta(\text{CNCd})$ e $\delta(\text{NCdO})$ em 272cm⁻¹(R) / 282cm⁻¹(IV).¹

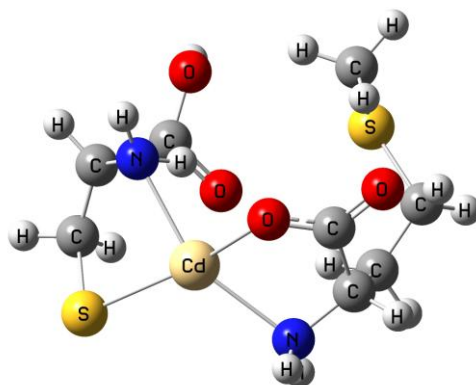


Figura 1. Estrutura do complexo [Cd(Cis)(Met)].

Na verdade as duas técnicas espectroscópicas se complementam, motivo pelo qual a maioria das bandas são coincidentes e ativas nos espectros Raman e infravermelho, variando somente a intensidade delas, como pode se observar na figura 2, através dos números que indicam as bandas coincidentes.

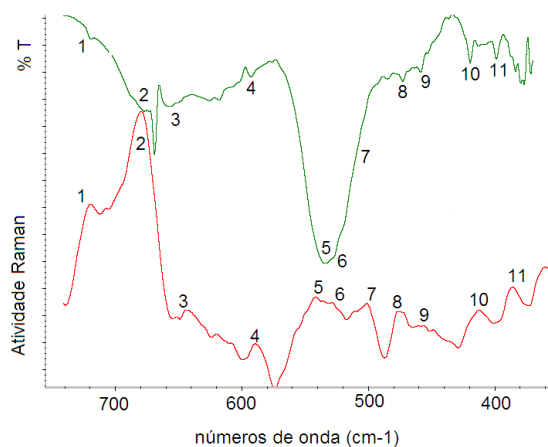


Figura 2. Espectro Raman e FT-IR, respectivamente, na região de baixa energia.

Conclusões

As atribuições vibracionais do complexo na região metal ligante são reafirmadas ao se analisar paralelamente os espectros no IV e Raman e auxiliado pelos cálculos mecânico quânticos.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Instituto de Química da UFRJ.

¹ Ramos, J. M. *Estudo estrutural espectroscópico vibracional de complexos bioinorgânicos metal-aminoácidos, com os metais Zn, Cd e Ni.* 2009, 2, 192-193,248-260.