

Determinação estrutural e análise espectroscópica vibracional do complexo bis-dietilditiocarbamato de cobre (II), [Cu(ddcb)₂]

Joanna M^a Ramos (PQ)^{1,2*}, Grisset F. Ondar (PQ)^{2,3}, Otávio Versiane (PQ)³

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

² Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Depto de Química Inorgânica, Outeiro de São João Batista s/n – Campus do Valonguinho - Centro – Niterói – RJ, CEP:24020-150.

³ Instituto Federal do Rio de Janeiro, Rua Senador Furtado, 121 - Maracanã – Rio de Janeiro, RJ, CEP:20270-021. jmramos@iq.ufrj.br

Palavras Chave: espectroscopia vibracional, DFT:B3LYP/6-311G, [Cu(ddcb)₂].

Introdução

O espectro infravermelho de complexos metal-ligante foi objeto de estudo de muitos pesquisadores.¹ 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. O presente trabalho teve o intuito de sintetizar o complexo bis-dietilditiocarbamato de cobre (II) (figura 1) para efeitos de estudo estrutural e análise vibracional. O espectro FT-IR apresenta excelente concordância com o espectro teórico (figura 2).

Resultados e Discussão

A otimização dos parâmetros geométricos foi feita pelo método do DFT com a base B3LYP/6-311G sendo o espectro corrigido pelo fator 0,9613. O recurso utilizado para atribuição vibracional foi a PDPG (Porcentagem de Desvio de Parâmetros Geométricos).² A utilização desse recurso consiste em uma atribuição vibracional mais precisa, mesmo na região de difícil atribuição (metal-ligante). Algumas atribuições vibracionais para o complexo [Cu(ddcb)₂], com participações significativas nas ligações Cu-S são: 351 cm⁻¹: ν(CuS) 34% + δ(SCS) 16% ; 310 cm⁻¹: ν(CuS) 31% + δ(CuSC)22% + δ(N=CS)28%; 112cm⁻¹: ν(CuS) 43% + δ(CuSC)35%.

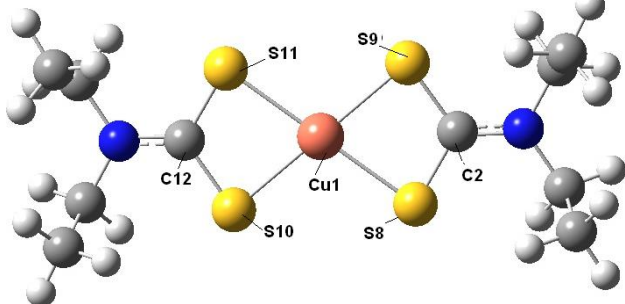


Figura 1. Geometria estrutural do complexo

O espectro FT-IR do complexo foi registrado em um espectrofotômetro Varian 660 IR FT-IR, resolução de 4cm⁻¹ e 80 scans. Através de métodos semi-empíricos e programas computacionais conseguimos propor a estrutura mais adequada e estável, bem como uma atribuição vibracional mais precisa.

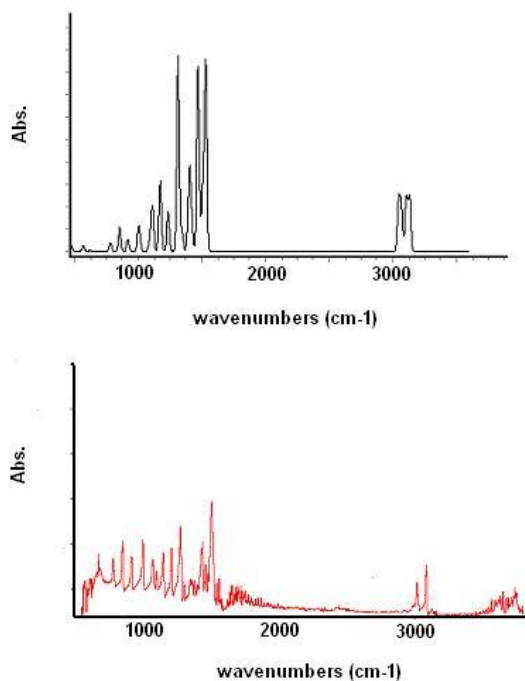


Figura 2. Espectros teórico e experimental, respectivamente do complexo [Cu(ddcb)₂].

Conclusões

O espectro teórico está de acordo com o espectro experimental corroborando assim a estrutura sugerida pelos cálculos mecânico-quânticos.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq e a CAPES pelas bolsas concedidas.

¹ Nakamoto, K., Infrared and Raman Spectra of inorganic and coordination compounds. 1986.

² J.M. Ramos et al. *Spectrochimica Acta Part A*. 2007, 68, 1370