

# Determinação estrutural teórica e análise espectroscópica no FT-IR do complexo aspartato-serinato de níquel (II).

Lygia Silva de Moraes (IC)<sup>1\*</sup>, Joanna M<sup>a</sup> Ramos (PQ)<sup>1</sup>, Lucas Martins L. Rodrigues (IC)<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 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

[lygia@ufjr.br](mailto:lygia@ufjr.br)

Palavras Chave: [Ni(Asp)(Ser)], PDPG, FT-IR

## Introdução

Este trabalho teve como objetivo a determinação teórica da estrutura do complexo binário formado por Níquel (II), Ácido Aspártico e Serina, por meio de métodos mecânico-quânticos, na síntese do [Ni(Asp)(Ser)] (figura 1), caracterizando a atribuição teórico-experimental do espectro vibracional FT-IV na região de baixa energia (figura 2) voltada apenas à análise das interações Níquel-Ligante.

## Resultados e Discussão

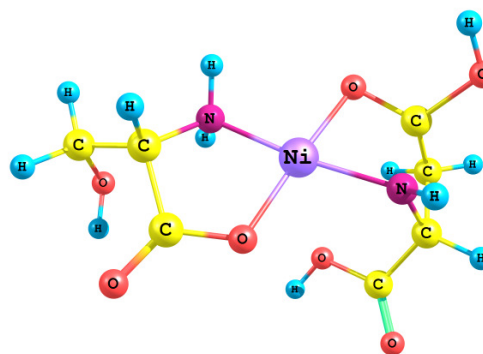
O espectro infravermelho do composto em estudo foi registrado em um espectrofotômetro Varian 660 FT-IR com resolução de 4cm<sup>-1</sup> realizando 120 registros com uma velocidade de 0,2cm<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup>. A amostra foi preparada em pastilha de polietileno. Os cálculos para otimização de geometria e determinação de números de onda vibracionais no infravermelho foram realizadas no programa Gaussian 98W®, utilizando a Teoria do Funcional de Densidade (DFT) usando o funcional B3LYP e a base 3-21G (6d,7f). Para a caracterização das atribuições teórico-experimentais no espectro vibracional utilizou-se o método de Percentagem de Desvio dos Parâmetros Geométricos (PDPG)<sup>1</sup>. Alguns resultados da análise espectroscópica quanto às atribuições do espectro FT-IR podem ser vistas na tabela 1:

| Frequência (cm <sup>-1</sup> ) |      | Atribuições  |
|--------------------------------|------|--|
| Calc.                          | Exp. |  |
| 174                            | 174  | $\delta(\text{ONiN})$ 21% + $\delta(\text{CONi})$ 17%  |
| 192                            | 196  | $\delta(\text{ONiN})$ 33% + $\delta(\text{CONi})$ 12%  |
| 462                            | 438  | $\nu(\text{NiO})$ 12% + $\delta(\text{ONiN})$ 17% + $\delta(\text{CONi})$ 16%                            |
| 552                            | 500  | $\nu(\text{NiN})$ 23% + $\delta(\text{ONiN})$ 13% + $\delta(\text{NiNC})$ 9% + $\delta(\text{CONi})$ 14% |
| 636                            | 612  | $\nu(\text{NiO})$ 19% + $\nu(\text{NiN})$ 15% + $\delta(\text{ONiN})$ 14% + $\delta(\text{CONi})$ 14%    |

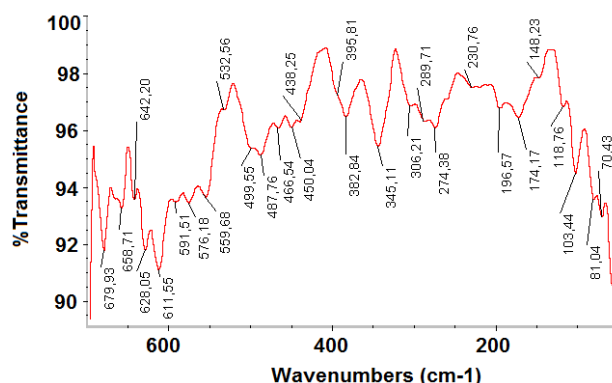
**Tabela 1.** Atribuições das bandas do Ni(Asp)(Ser) no espectro FT-IV do na região de baixa energia.

A análise das atribuições pode prever que conforme ocorre o aumento dos números de onda aumenta também a participação da coordenada interna  $\nu(\text{Níquel-Ligante})$ , como pode ser visto na tabela acima. Podemos na atribuição, prever a

composição majoritária das coordenadas internas que conformam o modo normal atribuído às bandas, para o espectro infravermelho na região metal – ligante.



**Figura 1.** Estrutura do [Ni(Asp)(Ser)].



**Figura 2.** Espectro FT-IV do [Ni(Asp)(Ser)] na região de baixa energia.

## Conclusões

A partir da análise das bandas nos espectros teóricos e experimentais pode-se calcular a composição majoritária de cada coordenada interna que conforma o modo atribuído à banda no espectro FT-IV para as interações Níquel-Ligante na região de baixa energia, realizando dessa forma uma atribuição espectroscópica mais precisa.

## Agradecimentos

Os autores agradecem ao Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro.

<sup>1</sup> Ramos, J. M. *Estudo estrutural espectroscópico vibracional de complexos bioinorgânicos metal-aminoácidos, com os metais Zn, Cd e Ni.* **2009**, 1, 5-35; 156-168; 177-191.