

# Atribuição comparativa no infravermelho para os complexos [Zn(Cis)(Gli)] e [Cd(Cis)(Gli)]

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@ufri.br](mailto:lygia@ufri.br)

Palavras Chave: [Zn(Cis)(Gli)], [Cd(Cis)(Gli)], FT-IR, PDPG

## Introdução

A análise espectroscópica de complexos utilizando a Teoria Funcional de Densidade (DFT) e o método de Percentagem de Desvio dos Parâmetros Geométricos (PDPG)<sup>1</sup> pode facilitar a atribuição espectroscópica dos números de onda encontrados. Ilustram-se neste trabalho as porcentagens do desvio das coordenadas internas Metal-Ligante para os complexos [Zn(Cis)(Gli)] e [Cd(Cis)(Gli)] (figura 1) dos modos normais correspondentes as diferentes bandas atribuídas na região Metal-Ligante nos espectros FT-IR (figura 2). A participação das diferentes coordenadas internas de estiramento está de acordo com o previsto pela equação do oscilador harmônico simples, seguindo a ordem:  $\nu(M-N) > \nu(M-O) > \nu(M-S)$ <sup>2</sup>.

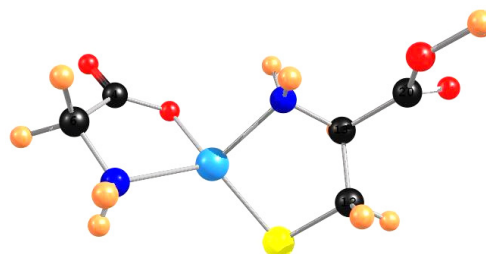
## Resultados e Discussão

Utilizando a DTF pode-se calcular a matriz dos modos normais para cada estiramento Metal-Ligante. O procedimento PDPG permitiu distinguir a participação majoritária das coordenadas internas de cada modo na região de baixa energia determinando as atribuições vibracionais para os complexos [Zn(Cis)(Gli)] e [Cd(Cis)(Gli)].

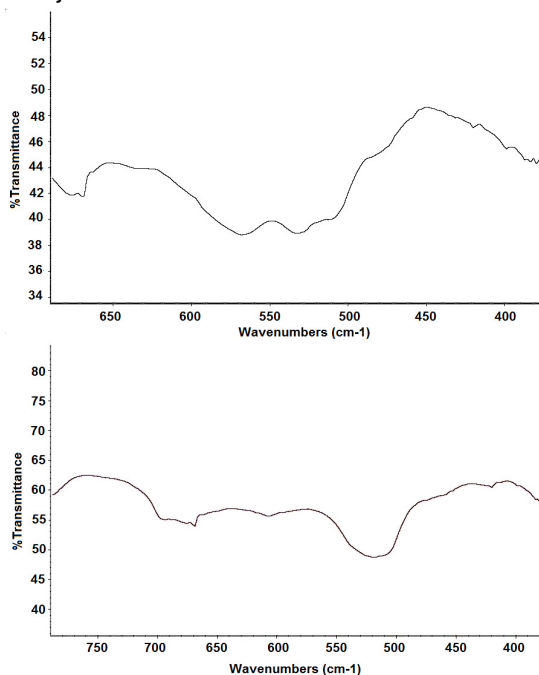
Os resultados confirmaram o previsto para a estrutura dos complexos: na região entre 750cm<sup>-1</sup> – 500cm<sup>-1</sup>, a participação das coordenadas internas de estiramento  $\Delta(Ni-O)$  e  $\Delta(Ni-N)$  tem maior incidência na faixa energética mais elevada (entre 650cm<sup>-1</sup> - 450cm<sup>-1</sup>), no entanto, maior participação das coordenadas internas de variação angular se localiza abaixo de 450cm<sup>-1</sup> (tabela 1).

Atribuição M=Zn/Cd	[Zn(Cis)(Gli)]		[Cd(Cis)(Gli)]	
	DFT (cm <sup>-1</sup> )	%	DFT (cm <sup>-1</sup> )	%
ν(MN)	497	10	491	23
	456	28	451	22
	426	19	428	21
	367	10	381	16
	336	14	332	17
ν(MS)	367	16	322	12
	242	12	240	15
ν(MO)	301	12	522	13
	-	-	286	10

**Tabela 1.** Comparação entre a intensidade das atribuições em ambos os complexos.



**Figura 1.** Estrutura do complexo [M(Cis)(Gli)]. Código de cores: azul celeste = M (Zn ou Cd); azul escuro = N; vermelho = O; preto = C; amarelo = S; laranja = H.



**Figura 2.** Espectro FT-IR do [Zn(Cis)(Gli)] e [Cd(Cis)(Gli)], respectivamente.

## Conclusões

Comprovou-se que conforme há o aumento da massa do cátion central, menor será a frequência no qual o estiramento metal ligante se encontra.

## 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, vol.1, 20-35, 46-111; vol.2, 192-277.

<sup>2</sup> Dias, José J.C.Teixeira. *Química Quântica, Fundamentos e métodos.* 1980, 133-137