

## Estrutura e atribuição vibracional do ácido 2-fenil-1,2,3-triazol-4-carboxilato

Anilton Coelho (PG)<sup>1,2\*</sup>, Joanna M<sup>a</sup> Ramos (PQ)<sup>2,3</sup>, Sérgio Pinheiro<sup>2</sup> (PQ), Claudio T. Soto (PQ)<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Instituto Federal do Rio de Janeiro, Rua Senador Furtado, 121 - Maracanã – Rio de Janeiro, RJ, CEP:20270-021

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

<sup>3</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

[aniltoncoelho@yahoo.com.br](mailto:aniltoncoelho@yahoo.com.br)

Palavras Chave: DFT:B3LYP/6-311G(d, p), FT- IR, ácido 2-fenil-1, 2, 3- triazol-4-carboxilato.

### Introdução

Com o intuito de ser utilizado como ligante devido à grande presença de pares de elétrons livres, foi realizada a síntese do ácido 2-fenil-1, 2, 3- triazol-4-carboxilato. A caracterização do composto foi feita por análise CNH-O, termogravimetria, RMN e mediante espectroscopia no infravermelho. A determinação estrutural foi obtida combinando o procedimento mecânico-quântico DFT:B3LYP/6-311G(d, p),<sup>1</sup> com a atribuição das bandas do espectro infravermelho experimental.<sup>2</sup>

### Resultados e Discussão

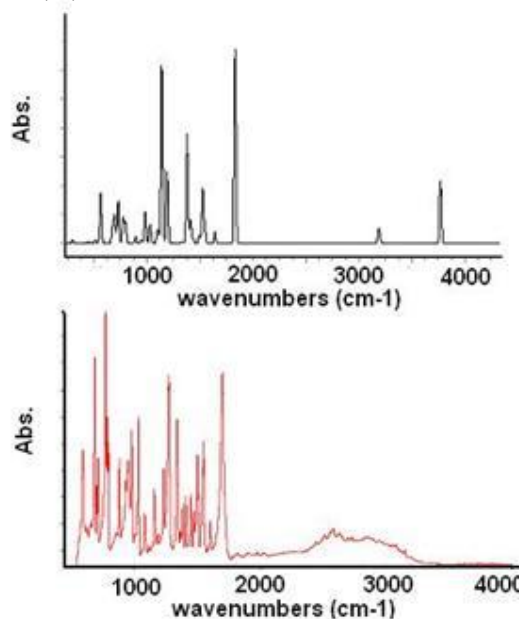
O espectro infravermelho com Transformada de Fourier do composto em estudo foi registrado em um espectrofotômetro Varian 660 IR FT-IR com resolução de 4 cm<sup>-1</sup> e 80 scans. O espectro experimental apresenta um grande número de bandas de combinação e sobretons entre 1870 cm<sup>-1</sup> e 3200 cm<sup>-1</sup>, e bandas de combinação típicas do benzeno monosubstituído (2021, 1967, 1897 e 1809 cm<sup>-1</sup>). O espectro teórico teve como base a estrutura geométrica ilustrada na figura 1 e apresentou excelente concordância com o espectro experimental (figura 2).



**Figura 1.** Estrutura geométrica do ácido 2-fenil-1, 2, 3- triazol-4-carboxilato.

Algumas bandas características são encontradas em: 30754, 3051 e 3024 cm<sup>-1</sup> se atribuem como  $\nu(\text{CH})_{\phi}$ ; 1594 e 1536 cm<sup>-1</sup> como  $\beta(\text{CCH}) + \text{Q}(\text{C}=\text{C})$ ; 1491 e 1400 cm<sup>-1</sup> como  $\text{Q}(\text{C}=\text{N})$  acoplado; 919, 869, 697 e 673 cm<sup>-1</sup> como  $\rho(\text{CH})$ .

34<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química



**Figura 2.** Espectro teórico e FT-IR à região de 500 – 4000 cm<sup>-1</sup>.

Devemos frisar que a relação de intensidade entre os espectros teórico e experimental não é a mesma, devido ao fato de que o espectro teórico é o resultado da análise de uma molécula em estado gasoso, enquanto que o espectro experimental corresponde ao espectro anarmônico, inerente as perturbações do estado sólido.

### Conclusões

A estrutura geométrica proposta foi confirmada com os cálculos teóricos, além de ter sido feita a atribuição vibracional completa do composto apresentado.

### Agradecimentos

Joanna M<sup>a</sup> Ramos e Claudio T. Soto agradecem a CAPES pelas bolsas concedidas.

<sup>1</sup> J.M. Ramos et al. Spectrochimica Acta Part A. **2007**, 68, 1370.

<sup>2</sup> J.M. Ramos et al. Spectrochimica Acta Part A. **2008**, 71,1364.