

Síntese, determinação estrutural teórica e análise espectroscópica no FT-IR do complexo bis(dietilditiocarbamato) de manganês (II).

Lygia Silva de Moraes (IC)^{1*}, Joanna M^a Ramos (PQ)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

lygia@ufrj.br

Palavras Chave: $Mn(DDCT)_2$, DFT, PDPG, FT-IR

Introdução

Complexos com Dietilditiocarbamato (DDCT) e metais de transição podem ser usados no auxílio ao tratamento do câncer e de diversas outras doenças¹, porém a falta de informações sobre complexos com este ligante na literatura dificulta sua caracterização.

Este trabalho tem como objetivo a síntese, a determinação estrutural teórica usando a DFT e a análise espectroscópica no FT-IR utilizando o método de Percentagem de Desvio dos Parâmetros Geométricos (PDPG)² do complexo bis(dietilditiocarbamato) de manganês (II) (figura 1), de forma a caracterizar a participação majoritária das coordenadas internas coordenadas internas de cada modo na região de baixa energia determinando as atribuições vibracionais.

Resultados e Discussão

Para a síntese do $Mn(DDCT)_2$ foram solubilizados 5mmol de DDCT (1,12g) por aproximadamente 5 minutos em água destilada, com solubilização incompleta. O sobrenadante foi separado por filtração simples e, a ele, adicionados 1,7mL da solução previamente preparada de cloreto de manganês 3mol/L. O precipitado foi filtrado à vácuo e colocado na estufa até secar.

Os cálculos para otimização de geometria e determinação de números de onda vibracionais no infravermelho foram realizadas no programa Gaussian 98W®, utilizando a DFT com o funcional B3LYP e a base 6-311G. Para a caracterização das atribuições teórico-experimentais no espectro vibracional (figura 2) utilizou-se o método PDPG. Alguns resultados desta análise podem ser vistos na tabela 1.

Frequência (cm ⁻¹)		Atribuições
Calc.	Exp.	
188	194	$\delta(SMnS)$ 43% + $\delta(CNC)$ 35%
364	377	$\nu(MnS)$ 32% + $\delta(CMnS)$ 28% + $\delta(SCS)$ 13%
541	555	$\nu(CS)$ 37% + $\delta(SMnS)$ 19% + $\delta(CNC)$ 19% + $\delta(SCS)$ 11%

Tabela 1. Atribuições das bandas do $Mn(DDCT)_2$ no espectro FT-IR do na região de baixa energia

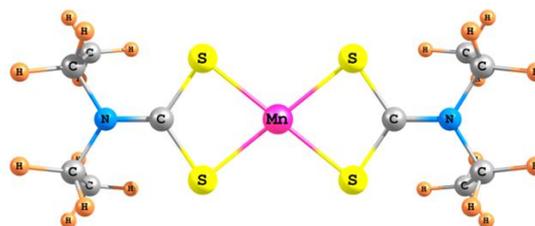


Figura 1. Estrutura do $Mn(DDCT)_2$.

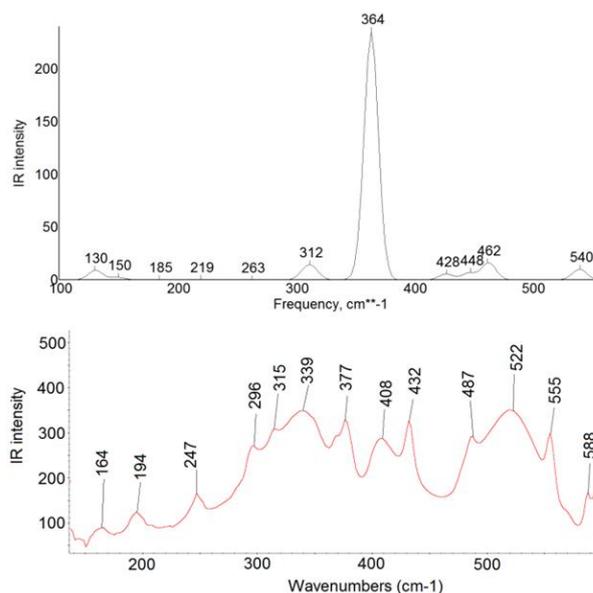


Figura 2. Espectros teórico e experimental no FT-IR do $Mn(DDCT)_2$, respectivamente.

Conclusões

Utilizando o método PDPG, pode ser feita a análise das bandas nos espectros teórico e experimental, na região de baixa energia, facilitando e tornando mais precisa a atribuição espectroscópica de cada coordenada interna que conforma o modo atribuído à banda no espectro FT-IR.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) e ao Instituto Federal do Rio de Janeiro (IFRJ).

¹ HAZARDOUS SYBSTANCES DATA BANK. Disponível em: <<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/f?./temp/~Fxbm5W> :1 > Acesso em 15 de dezembro 2011

² Ramos, J. M. *Estudo estrutural espectroscópico vibracional de complexos bioinorgânicos metal-aminoácidos, com os metais Zn, Cd e Ni.* 2009, vol.1, 46-111.