

Análise Vibracional de Compostos de Coordenação de Níquel(II): Uma Aproximação aos Grupos Pontuais.

Sergio Kogikoski¹ (PG), Juliana S. Souza¹ (PG)*, Paula Homem-de-Mello¹ (PQ), Herculano Martinho¹ (PQ), Romulo A. Ando (PG)², Wendel Andrade Alves¹ (PQ)

wendel.alves@ufabc.edu.br

¹ Universidade Federal do ABC (UFABC) - Centro de Ciências Naturais e Humanadas - Rua Santa Adélia, 166, Santo André - SP – Brasil.

² Universidade de São Paulo – Instituto de Química – C.P. 26077, São Paulo, SP.

Palavras Chave: Teoria de Grupo, experimento didático, espectroscopia de infravermelho e Raman.

Introdução

A Teoria de Grupos é uma representação das propriedades de simetria de um sistema. De fato, o conjunto de transformações, ou operações de simetria, sobre as quais um dado objeto é invariante é definido como grupo. Essas transformações, podem ser utilizadas em diversas aplicações como a obtenção dos possíveis modos vibracionais de moléculas ou sólidos e as correspondentes regras de seleção em espectroscopia vibracional (absorção no infravermelho (IR) e espalhamento no Raman).¹ Devido à sua complexidade, a Teoria de Grupo tem sido negligenciada em alguns cursos de graduação em Química. O objetivo deste trabalho é apresentar um experimento executado durante a disciplina de “Ligações Químicas” para os alunos de graduação do curso de Ciência & Tecnologia na UFABC com o propósito de facilitar e encorajar o ensino e aprendizagem de Teoria de Grupo.

Este trabalho foi tema do trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Química) do Aluno Sergio Kogikoski da UFABC e foi recentemente aceito para publicação na revista Química Nova.²

Resultados e Discussão

Para realização do experimento, foram utilizados os compostos $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]\text{X}_2$ ($\text{X} = \text{ClO}_4^-$, BF_4^- e PF_6^-). Esses complexos foram sintetizados de acordo com procedimento descrito na literatura e seus espectros vibracionais (IR e Raman) foram obtidos e analisados pelos alunos.

Devido à complexidade do sistema, a estratégia adotada foi a decomposição do sistema em blocos independentes de acordo com a simetria local.

O ligante NH_3 , por exemplo, (C_{3v} , piramidal triangular) apresenta 6 graus de liberdade vibracionais (uma vez que toda molécula apresenta $3N-6$ graus de liberdade vibracionais, onde N = número de átomos da molécula). Com base nos modelos de vibrações moleculares para sistemas C_{3v} , verifica-se que apenas duas bandas são ativas

no IR (um dos modos A_1 e um dos modos E, Fig. 1), mostrando variação do momento de dipolo da molécula. Os demais modos vibracionais são ativos no Raman.

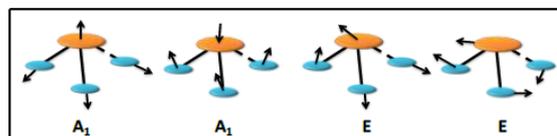


Fig. 1: Modos vibracionais de uma molécula com simetria C_{3v} .

A correlação entre a Teoria de Grupo e os picos observados nos espectros de IR e Raman mostra que, no caso do espectro de IR do NH_3 , duas bandas na região de 3300 a 3400 cm^{-1} possuem simetria A_1 e E, e uma banda em $\sim 1600 \text{ cm}^{-1}$ tem simetria E. No espectro Raman, duas bandas em ~ 1600 e $\sim 3400 \text{ cm}^{-1}$ podem ser atribuídas aos estados vibracionais degenerados E. Uma banda em $\sim 3200 \text{ cm}^{-1}$ é atribuída ao modo E e outra em $\sim 3300 \text{ cm}^{-1}$ é atribuída ao modo A_1 .

O mesmo tratamento foi realizado para os ligantes ClO_4^- , BF_4^- e PF_6^- , e para o sistema $\text{Ni}(\text{NH}_3)_6^{2+}$.

Conclusões

Foi apresentado um experimento realizado pelos alunos de graduação da UFABC que relaciona Teoria de Grupo e experimentos de Química Inorgânica.

A proposta foi bem sucedida tendo em vista o aumento no nível das discussões entre os alunos, bem como melhora de desempenho nas avaliações.

Agradecimentos

FAPESP (Proc. No. 2008/53576-9; 2007/05370-0; 2010/09891-7), CNPq (Proc. No. 474871/2010-0) e ao INCT de Bioanalítica (CNPq, Proc. No. 573672/2008-3 e FAPESP, Proc. No. 08/57805-2).

¹ Cotton, F. A. *Chemical Applications of Group Theory*, 3rd ed., Wiley: New York, 1990.

² Kogiosi, S.; Souza, J. S.; Homem-de-Mello, P.; Martinho, H.; Alves, W. A. Análise Vibracional de Compostos de Coordenação de Níquel(II): Uma Aproximação aos Grupos Pontuais, *Química Nova*, REF. 70511.