

Mudança do padrão de intensificação no efeito Raman ressonante do composto de coordenação Fe(phendxm)₃

Juliano Vicente^{1**} (PG); Fernanda P. Carli² (PG); Norberto S. Gonçalves^{2*} (PQ) (*) nsgoncal@gmail.com (**) in memorian

(1) Depto de Química, UFSC, Florianópolis, SC, CEP 88040-900; (2) Depto de Ciências Exatas e da Terra, UNIFESP, Diadema, SP, CEP 09972-270

Palavras Chave: efeito Raman ressonante, ligante fenantrolínico, ferro(II), 5,6-dioxima-1,10-fenantrolina

Introdução

Compostos de coordenação fenantrolínicos envolvendo íons de metais de transição da primeira série são bem conhecidos. Em particular, o íon Fe(II) forma compostos com intensas transições de transferência de carga. Os ligantes dioxímicos derivados da 1,10-fenantrolina são interessantes por possuírem dois possíveis sítios de coordenação, que são os nitrogênios fenantrolínicos ou os nitrogênios oxímicos.¹ Na literatura, o complexo de Cu(II) reportado apresenta coordenação pelos nitrogênios fenantrolínicos,² e para Fe(II), essa é uma questão ainda em aberto. Outro ponto importante é a questão do padrão de intensificação Raman ressonante, enquanto que no complexo Fe(phen)₃ intensificam principalmente os modos do anel fenantrolínico, no complexo Fe(phendxm)₃, observa-se grande intensificação dos modos da região de baixas frequências, contrastando com o padrão usualmente observado.³

Resultados e Discussão

O ligante phendxm foi obtido a partir da reação entre a fenantrolina-5,6-diona com cloridrato de hidroxilamina em etanol absoluto na presença de BaCO₃. Reagiu-se então o ligante com Fe(ClO₄)₂·6H₂O em meio de metanol e CHCl₃, em refluxo sob atmosfera de N₂ por 24 horas, obtendo-se um precipitado verde-escuro. Também foram sintetizados os complexos de Ni(II) e Cu(II), em todas as sínteses foi utilizada a proporção 2:1 ligante/metal. Foram obtidos os espectros Raman no microscópio Raman Renishaw, com a linha excitante em 632,8 nm. Observa-se no espectro eletrônico do complexo de Fe(II) uma banda de transferência de carga com máximo em ca. 600 nm. Em decorrência disto, o espectro Raman do complexo de Fe(II), excitado em 632,8 nm, está na região de pré-ressonância, o que intensifica vários modos na região de baixa frequência, contrastando com os complexos de Ni(II) e Cu(II), bem como com o padrão observado no Fe(phen)₃. O padrão de deslocamentos observados na região dos modos do anel sugere que a coordenação ocorra pelos nitrogênios fenantrolínicos.

37^ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Figura 1. Espectros Raman do ligante e seus complexos de Ni, Fe e Cu.

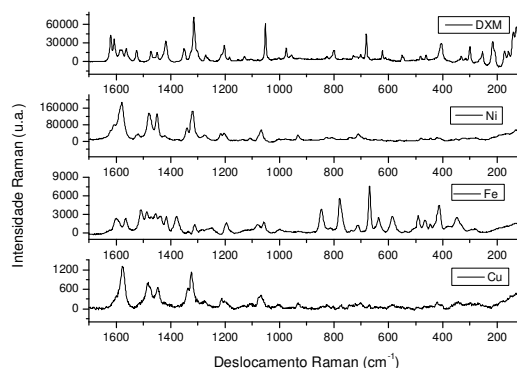
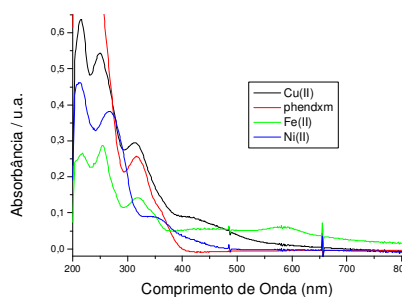


Figura 2. Espectros UV-Vis do ligante e seus complexos de Ni, Fe e Cu.



Conclusões

O complexo de Fe(II) apresenta banda de transferência de carga na região de 600 nm e a coordenação ocorre provavelmente pelos nitrogênios fenantrolínicos.

Agradecimentos

CNPq, UNIFESP

¹ Vicente, J., Dissertação de Mestrado, PPG-QMC, Depto de Química, UFSC, Florianópolis, 2008.

² Das, O.; Paria, S.; Zangrando, E.; Paine, T.K.; *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 11375.

³ Clark, R.J.H.; Turtle, P.C.; Strommen, D.P.; Streusand, B.; Kincaid, J.; Nakamoto, K.; *Inorg. Chem.* **1977**, *16*, 84