

ANÁLISE VIBRACIONAL TEÓRICA E EXPERIMENTAL DOS COMPLEXOS DE CD(II) E HG(II) CONTENDO LIGANTE BUTIL XANTATO

Congresso Online Nacional de Química, 4ª edição, de 04/04/2022 a 06/04/2022
ISBN dos Anais: 978-65-81152-51-2

MIRANDA; Daniella Brito de ¹, QUINTAL; Susana Maria de Ornelas², FERREIRA; Glaucio Braga³

RESUMO

É de conhecimento que os metais pesados apresentam riscos para os seres humanos, animais e plantas por serem bioacumuladores e não biodegradáveis. Por conta disso, torna-se necessária a busca por compostos capazes de remover estes metais de ambientes aquosos. Os xantatos são uma classe de compostos orgânicos que atuam na remoção daquelas espécies de águas residuais. Estes compostos são de interesse para o processo de descontaminação devido a presença do grupo $-OS_2$ em sua estrutura, o que os torna capazes de se coordenar de diferentes maneiras a centros metálicos. Este trabalho tem por objetivo comparar os dados espectroscópicos experimentais e teóricos, partindo de diferentes estruturas calculadas. Para isto, foi realizado um estudo teórico-experimental através da espectroscopia vibracional dos complexos de Cd^{2+} e Hg^{2+} contendo o ligante butil xantato. Os complexos 1, $[Cd(butxant)_m]_n$ e 2, $[Hg(butlxant)_m]_n$ foram sintetizados a partir do butil xantato e dos sais $CdCl_2 \cdot H_2O$ e $HgCl_2$, respectivamente. Através do programa Gaussian, foram realizados cálculos dos modos vibracionais para os complexos de Cd^{2+} e Hg^{2+} contendo dois ligantes bidentados, com uma geometria tetraédrica distorcida. Além deste sistema, foram avaliadas as estruturas tetraédricas contendo 4 ligantes butil xantato monodentados, a fim de verificar o efeito polimérico encontrado na literatura. Por fim, alguns modos vibracionais foram analisados através da distribuição da energia vibracional, utilizando o programa VEDA. No complexo monodentado de Hg^{2+} contendo 4 ligantes butil xantatos, foi observada uma maior densidade de carga negativa sobre os átomos de enxofre não ligados ao centro metálico. Tal resultado justifica a formação de polímero encontrada na literatura, visto que o átomo de enxofre atua como sítio coordenante ao íon metálico. Desta forma, uma alta densidade eletrônica sob este átomo favorece a ligação com outro íon Hg^{2+} , levando a formação da rede polimérica. Já o complexo de Cd^{2+} contendo 4 ligantes butil xantatos, mostrou a formação de dois quelatos, indicando um efeito cinético. Além disso, a análise experimental de infravermelho mostrou a presença do estiramento $\nu S-C-S$ na região de 1014 cm^{-1} e 1040 cm^{-1} para os complexos de Hg^{2+} e Cd^{2+} , respectivamente. Já a presença do $\nu M-S$ foi observada através do infravermelho na região FAR, abaixo de 400 cm^{-1} . O resultado obtido através do cálculo dos modos vibracionais mostrou o valor em 1046 cm^{-1} para o complexo de Cd^{2+} com 2 ligantes bidentados, que apresentou 30% de contribuição da ligação C-S. Além do estiramento do grupo CS_2 , foi observado o $\nu Cd-S$ em 303 cm^{-1} , com contribuição de 17%. Por fim, o sistema contendo 4 ligantes mostrou νCS_2 em 1077 cm^{-1} , contendo 19% da ligação C-S. Já o $\nu Cd-S$ foi observado em 280 cm^{-1} , com contribuição de 15%. Os resultados do $\nu S-C-S$ nos sistemas bidentado e monodentado foram próximos ao experimental. No entanto, foi observado que o $\nu Cd-S$ para a estrutura com os 4 ligantes monodentados teve maior proximidade ao valor experimental em 247 cm^{-1} . Desta forma, os dados obtidos sugerem complexos com estruturas poliméricas, que deve ser estabelecida por uma influência eletrostática. Eixo temático: Química Inorgânica Resumo - Sem apresentação oral

PALAVRAS-CHAVE: Análise vibracional, Cádmio, Mercúrio, Xantato

¹ Universidade Federal Fluminense, daniellabrito@id.uff.br

² Universidade Federal Fluminense, squintal@id.uff.br

³ Universidade Federal Fluminense, glauciobi@id.uff.br

¹ Universidade Federal Fluminense, daniellabrito@id.uff.br
² Universidade Federal Fluminense, squintal@id.uff.br
³ Universidade Federal Fluminense, glauciobf@id.uff.br