

UTILIZAÇÃO DA TÉCNICA DE ESPECTROSCOPIA DE ABSORÇÃO NA REGIÃO DO VISÍVEL NA INVESTIGAÇÃO DAS ENERGIAS DE ESTABILIZAÇÃO DO CAMPO CRISTALINO DE ALGUNS COMPOSTOS DE COORDENAÇÃO

Maria Aparecida da Silva; Melina Kayoko Itokazu Hara (orientador) - Química
maria.dasilva@edu.ung.br

PALAVRAS-CHAVE: Compostos de coordenação. Complexos metálicos de Co(III) e Cu(II). Espectrofotometria UV-Vis. Energia de estabilização do campo cristalino.

O estudo das relações entre a cor de um complexo de metal de transição e a energia de estabilização do campo cristalino é um ponto de grande importância na química dos compostos de coordenação, correlacionando-as com a energia de estabilização do campo cristalino. Assim, para interpretar os espectros de absorção na região do ultravioleta e visível em metais de transição utiliza-se geralmente a Teoria do Campo Cristalino (TCC). Essa teoria permite abordar de uma forma bastante simples a formação dos compostos de coordenação, possibilitando a visualização dos efeitos das ligações metal-ligante sobre os orbitais, correlacionando-as com a energia de estabilização do Campo Cristalino. Os compostos de coordenação são fascinantes, principalmente porque possuem uma variedade de cores, e para um determinado átomo central, esta mudança de cores pode ser observada em função da troca dos ligantes, dependendo do número de elétrons nos orbitais d, da natureza do íon metálico e da disposição espacial dos ligantes em torno do átomo.

Assim, neste trabalho foram obtidos os espectros eletrônicos dos complexos, $[\text{Cu}(\text{OH}_2)_6]^{+2}$, $[\text{Cu}(\text{Edta})]^{+2}$, $[\text{Cu}(\text{en})_3]^{+2}$, $[\text{Co}(\text{SCN})_6]^{+2}$, $[\text{CoCl}_6]^{+2}$ e $[\text{Co}(\text{OH}_2)_6]^{+2}$, a fim de investigar as cores apresentadas por esta classe de compostos, correlacionando-as com a energia de estabilização do campo cristalino. As energias de estabilização do campo cristalino foram calculadas, colocando em ordem decrescente de $10 Dq$ (força do campo) os complexos com os respectivos ligantes $L = \text{H}_2\text{O}$, etilenodiamina (en), edta, Br^- , Cl^- e SCN^- , utilizando-se a série espectroquímica dos ligantes.

Os complexos estudados no presente trabalho são formados por um metal de transição com diferentes ligantes, os quais apresentam níveis dos orbitais d com diferentes energias, devido ao efeito que exercem esses ligantes no campo cristalino. Assim, existem alguns níveis com mais energia e outros com menos energia e quando são irradiados com radiação eletromagnética de frequência adequada, ocorre a absorção, provocando a transferência de um elétron de um nível de energia mais baixo para um nível de energia mais alto. Dependendo da diferença de energia existente entre os dois níveis, que dependerá do tipo de complexo, esse absorverá em frequências diferentes, levando a diferentes cores.

O parâmetro de desdobramento do campo cristalino obtido para cada complexo varia de acordo com a natureza do ligante. Verificou-se neste trabalho que determinados ligantes provocam um maior desdobramento de campo do que outros, ou seja, com o aumento da energia da transição, o complexo absorverá em um comprimento de onda menor, resultando em diferentes cores para os respectivos complexos.

Neste trabalho, os valores calculados de Energia de Estabilização do Campo Cristalino para os complexos $[\text{Cu}(\text{OH}_2)_6]^{+2}$, $[\text{Cu}(\text{en})_3]^{+2}$ e $[\text{Cu}(\text{EDTA})]^{+2}$, encontram-se coerentes com a série espectroquímica.

Projeto elaborado com o apoio do Programa Institucional de Iniciação Científica da Universidade Guarulhos - UnG (Rodada 2011- II).