

6 Objetivos

Os trabalhos existentes em espectroscopia vibracional realizados com aminoácidos como ligantes para a formação de complexos são incompletos no que diz respeito à caracterização vibracional e à análise estrutural desses compostos. Aliado a isso, a escassez de informação na literatura científica sobre espectros vibracionais de complexos de metais tendo aminoácidos como ligantes contribuiu significativamente na escolha do tema, assim como na escolha dos complexos. Em virtude disso, o presente projeto apresenta como objetivos:

1) Determinação teórica da estrutura dos complexos ternários, e de um complexo binário, formados pelos íons metálicos Zn(II), Cd(II) e Ni(II) com os aminoácidos serina, metionina, glicina, ácido aspártico, ácido guanidoacético e cisteína, usando métodos de mecânica – quântica: semi - empíricos, *ab – initio*, incluindo o procedimento de cálculo baseado na Teoria do Funcional de Densidade (DFT), e empregando-os de acordo com a necessidade. Os complexos a serem estudados são: [Zn(Cis)(Gli)], [Zn(Gli)(Met)], [Zn(Cis)(Met)]; [Cd(Cis)(Gli)], [Cd(Gli)(Met)], [Cd(Cis)(Met)]; [Ni(Gaa)(Gli)], [Ni(Gaa)₂], [Ni(Asp)(Ser)] e [Ni(Asp)(Gaa)].

2) Determinar por procedimento mecânico – quântico a análise dos Orbitais Naturais de Ligação (NBO) com o intuito de conhecer a real hibridização do cátion metálico na formação do complexo, assim como a hibridização dos átomos que formam parte da esfera de coordenação do complexo. O trabalho foi realizado para dois complexos de Ni(II) com o intuito de conhecer a real hibridização do íon Ni(II).

3) Atribuir experimentalmente os espectros FT- Infravermelho e FT-Raman (quando possível) dos complexos, tendo como base espectros comparativos informados na literatura.

4) Como uma nova proposta de análise, o trabalho visará a determinação aprimorada e/ou caracterização dos diferentes modos normais baseados na geometria de não equilíbrio, ou perturbado da molécula, seguindo a metodologia

proposta por PDPG (Percentagem de Desvio de Parâmetros Geométricos), concluindo com a atribuição teórica experimental dos diferentes espectros vibracionais.