



XXIX CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA (CIC)  
2019  
UACSA, UAST, UFAPE, CODAI e UEADTEC  
Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Coordenação de Programas Especiais



## MODELAGEM DO ESPECTRO DE ABSORÇÃO DO PRODUTO PÚRPURA DE RUHEMANN

Gerlânia Francelino Rodrigues\*, Eduardo de Castro Aguiar  
E-mail: gerlania.bel@gmail.com

Unidade Acadêmica de Serra Talhada, Universidade Federal Rural de Pernambuco, Serra Talhada-PE

O Púrpura de Ruhemann (RP) é o produto da reação da ninidrina com aminoácidos, possuindo uma forte banda de absorção em aproximadamente 575 nm. Por formar complexos fotoluminescentes, a complexação do RP com metais é utilizada para melhorar a revelação de impressões digitais, auxiliando em investigações criminais. A coordenação do RP com íons de metais de transição como Zn(II) ou Cd(II), por exemplo, desloca a principal banda de absorção do RP e aumenta sua intensidade. Quando complexado com o Zn(II), por exemplo, a banda de absorção do Púrpura de Ruhemann é deslocada de 575 nm para 485 nm. Na literatura, essas mudanças espectrais foram relacionadas a diminuição do ângulo de torção entre os anéis indandiônicos. Neste trabalho, realizamos a modelagem computacional de complexos de metais de transição com o RP, já reportados na literatura, os ligantes e complexos foram completamente otimizados ao nível DFT com os funcionais B3LYP e BP86, ambos com o conjunto de funções de base def2-TZVP em fase gás e com solvatação implícita em MeOH no programa Orca 4.0.1. Realizamos também uma análise exploratória com o método semiempírico PM6, no programa MOPAC2016. As geometrias de equilíbrio foram confirmadas por cálculos de frequência. O espectro de absorção do RP foi calculado para o ligante isolado com ângulos de torção entre 0° e ~70°, de modo a avaliar o efeito da torção no espectro em fase gás e em fase condensada. O espectro de absorção calculado para RP isolado é dominado por transições  $\pi \rightarrow \pi^*$  e apresentou o mesmo perfil experimental. A diminuição da torção desloca a principal banda para menores comprimentos de onda, mas não na mesma dimensão do observado nos complexos. Tal deslocamento está associado a formação de bandas de transferência de carga entre ligantes RP e cloro, por exemplo. Esta observação microscópica confere nova importância à presença de outros ligantes, além do RP, nos complexos de metais de transição formados pelo pós-tratamento das impressões digitais reveladas com ninidrina.

**Palavras-chave:** Cd(II), Zn(II), Púrpura de Ruhemann, compostos de coordenação, modelagem computacional, DFT.

**Área do Conhecimento:** Ciências Exatas e da Terra.

Realização:



Apoio:



F A D U R P E