



E0470

CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DO CRISTAL DE BIS(L-HISTIDINATO)NI(II) MONOHIDRATADO

Edgar Castanha Junior (Bolsista SAE/UNICAMP) e Prof. Dr. Lisandro Pavie Cardoso (Orientador), Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW, UNICAMP

Bis(L-histidinato)Ni(II) Monohidratado $\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_3\text{O}_2)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ cristaliza-se na simetria monoclinica com 4 moléculas por célula unitária, grupo espacial C2 e parâmetros de rede $a = 29,406(4) \text{ \AA}$, $b = 8,2675(9) \text{ \AA}$, $c = 6,3135(6) \text{ \AA}$ e $\beta = 90,01^\circ$ [T. Sakurai and H. Iwasaki, Acta Crystallogr., B34, 660 (1978)]. Os átomos de Ni apresentam coordenação octaédrica ligando-se a duas moléculas de histidina. Para obter os cristais desse material, 1 mol de $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ foi adicionado a uma solução aquosa com 2 moles de L-histidina. NaOH foi adicionado a esta solução para mudar o seu pH. Foram crescidos vários cristais com o pH da solução variando de 6 a 14. Pequenos cristais de cor violeta foram crescidos pelo método da evaporação lenta com a temperatura mantida constante a 30°C , e, sob a forma de policristais, as amostras foram caracterizadas por difração de raios-X. Nas análises, o método Rietveld foi utilizado para se obter um comportamento dos parâmetros de rede desses cristais em função do pH da solução, já que o pH pode mudar a distribuição de cargas da molécula de histidina e, assim, causar mudanças na estrutura cristalina desse material. Medidas de curvas de rocking e topografia de raios-X sob geometria de reflexão (método de Berg-Barrett) também foram realizadas para permitir a análise da perfeição cristalina dos monocristais crescidos.

DRX - Crescimento de cristais - Aminoácido