

## Síntese e estudo estrutural de dois novos polímeros de coordenação unidimensionais

Iara M. L. Rosa (PG)<sup>1</sup>, Ana C. S. Zucchi (IC)<sup>1</sup>, Laise Amorim (IC)<sup>2</sup>, Carlos B. Pinheiro (PQ)<sup>3</sup>, **Antonio C. Doriquetto (PQ)<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL-MG), Alfenas, Minas Gerais, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil.

<sup>3</sup>Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil.

Palavras Chave: *polímero de coordenação, cobalto, fumárico, adípico*

### Introdução

Polímeros de coordenação são um subconjunto dos polímeros inorgânicos que contém como unidades básicas de construção íons metálicos e ligantes orgânicos arranjados infinitamente levando a redes uni, bi e tridimensionais.<sup>1</sup> Embora os polímeros de coordenação unidimensionais sejam considerados menos interessantes estruturalmente quando comparados aos seus análogos bi e tridimensionais, eles apresentam propriedades interessantes, tais como propriedades magnéticas, elétricas, mecânicas e ópticas.<sup>1</sup> Neste trabalho, será reportada a síntese e caracterização estrutural, por difração de raios X por monocristal, de dois novos polímeros de coordenação unidimensionais envolvendo  $\text{Co}^{2+}$  como centro metálico e os ácidos adípico (I) e fumárico (II) como ligantes.

### Resultados e Discussão

Os presentes compostos foram sintetizados partindo de 0,2 mmol de  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  e 0,1 mmol dos ácidos supracitados, utilizando o método de difusão (DMSO e água como solventes). Obtiveram-se, diretamente a partir da síntese, monocristais, os quais foram utilizados para o experimento de difração de raios X por monocristal. As medidas foram conduzidas utilizando radiação  $\text{MoK}\alpha$  a 100K em um difratômetro Gemini/Orford. A análise dos dados cristalográficos de (I) e (II) mostram a formação de uma cadeia polimérica, em que o íon  $\text{Co}^{2+}$  atua como centro metálico, coordenado por moléculas dos ligantes, tendo a esfera de coordenação completada por moléculas de DMSO para (I) e DMSO/água para (II). A análise realizada com o auxílio do software MOGUL<sup>2</sup> mostra que a geometria intramolecular apresenta boa concordância com os valores encontrados para fragmentos semelhantes de moléculas depositadas no CSD (Cambridge Structural Database).<sup>3</sup> Embora ambos sejam polímeros de coordenação unidimensionais, apresentam importantes diferenças estruturais decorrentes da insaturação da cadeia

carbônica dos ligantes utilizados. O ácido adípico, um ligante flexível consequência de sua cadeia saturada, levou a formação de um polímero de coordenação do tipo fita, que se estende ao longo da direção [010]. Já o ligante insaturado e rígido - ácido fumárico - leva a formação de um polímero de coordenação unidimensional linear, que também se estende ao longo da direção [010] de sua cela unitária. Ao nível supramolecular, o composto (I) não é capaz de estender sua dimensionalidade, devido a presença de moléculas de DMSO na esfera de coordenação do metal (que não são potenciais doadores/aceptores de ligações de hidrogênio). Por outro lado, o composto (II) forma uma rede supramolecular bidimensional ao longo do plano (101) a partir de ligações de hidrogênio intermoleculares clássicas envolvendo o sistema O3-H9...O1 (com distância D-A igual a 2,735 Å).

### Conclusões

Dois novos polímeros de coordenação unidimensionais foram sintetizados a partir da técnica de difusão do solvente, o que permitiu a obtenção de monocristais para o experimento de difração de raios X por monocristal. Observou-se, através dos resultados, a influência da cadeia do ligante orgânico utilizado, na estrutura final do polímero de coordenação obtido.

### Agradecimentos

FAPEMIG, CNPq, CAPES, FINEP, LabCri pelas medidas de difração de raios X e UNIFAL-MG.

<sup>1</sup> W. L. Leong, J. J. Vittal, Chem. Rev. (2011) 111, 688.

<sup>2</sup> I. J. Bruno, J. C. Cole, M. Kessler, Jie Luo, W. D. S. Motherwell, L. H. Purkis, B. R. Smith, R. Taylor, R. I. Cooper, S. E. Harris and A. G. Orpen, J. Chem. Inf. Comput. Sci., 44, 2004, 2133-2144.

<sup>3</sup> I. J. Bruno, J. C. Cole, P. R. Edgington, M. Kessler, C. F. Macrae, P. McCabe, J. Pearson and R. Taylor, Acta Cryst., B58, 2002, 389-397