

Síntese, Caracterização Espectroscópica e Estrutura Cristalina de um Novo Polímero de Coordenação de La(III) Contendo o Ânion 2,6-Piridinodicarboxilato.

Kaique A. Doliveira¹(IC), Maria Clara Ramalho²(PG), Lippy F. Marques¹(PQ) e Flávia Cavaliere Machado¹(PQ).

Email: *kaique93jf@hotmail.com

¹Departamento de Química ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Campus Universitário Martelos, 36.036-330, Juiz de Fora – MG, Brasil.

²Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Campus do Valonguinho Centro, 24.020-150, Niterói-RJ, Brasil.

Palavras Chave: Estrutura cristalina, Ácido 2,6-Piridinodicarboxílico, Lantanídeos.

Introdução

Compostos de lantanídeos são extensivamente estudados no estado sólido^[1] e esses estudos têm basicamente como objetivo a síntese, caracterização, tipo de coordenação metal-ligante, decomposição térmica e principalmente as propriedades magnéticas e espectroscópicas. Os ligantes também influenciam diretamente sobre as propriedades do metal ao qual estão coordenados, atribuindo-lhes características únicas que permitem o uso desses materiais em diferentes áreas de interesse comercial e biológico. Em particular, o ácido 2,6-piridinodicarboxílico (2,6-H₂PDC), um ligante multidentado rígido, que apresenta os modos de coordenação quelato e em ponte, é muito utilizado na síntese de inúmeros complexos^[2]. Nesse trabalho, relatamos a síntese, caracterização espectroscópica e a estrutura cristalina de um novo polímero de coordenação de La(III) envolvendo o ânion 2,6-PDC²⁻, de fórmula molecular [La₂(2,6-PDC)₃(H₂O)₂·4H₂O]_n.

Resultados e Discussão

A Figura 1 abaixo mostra o esquema de síntese do complexo em estudo.



Figura 1: Rota sintética de formação do polímero de coordenação.

A determinação estrutural por difração de raios X por monocristal, revela que o íon La(III) se encontra coordenado por 5 átomos de oxigênio e 2 átomos de nitrogênio provenientes dos ligantes 2,6-PDC²⁻ e a 2 átomos de oxigênio provenientes de duas moléculas de água, resultando em um número de coordenação 9, dando origem a uma geometria prismática trigonal triencapuzada distorcida (Figura 2). Um dos grupos carboxilatos do ligante 2,6-PDC²⁻ atua em ponte entre dois sítios de La(III), evidenciando a formação de uma cadeia polimérica unidimensional (1D) que se estende ao longo do eixo cristalográfico a.

38ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

O espectro de absorção no infravermelho (IV) do ácido 2,6-H₂PDC exibe uma banda em 1575 cm⁻¹, característica do estiramento ν_{C-C}/CN presente no anel piridínico. No espectro do complexo essa banda se encontra deslocada para 1606 cm⁻¹, indicando a coordenação do ligante 2,6-PDC²⁻ por meio dos nitrogênios piridínicos. O espectro IV do complexo exibe ainda três bandas intensas relativas aos estiramentos dos grupos carboxilatos: em 1633 cm⁻¹ e 1584 cm⁻¹ atribuídas ao modo ν_{asym}(COO⁻) e em 1393 cm⁻¹ atribuída ao modo ν_{sym}(COO⁻). O espectro de espalhamento Raman do complexo apresenta uma banda intensa em 1020 cm⁻¹ atribuída ao modo de estiramento do anel piridínico, indicando a presença do ligante 2,6-PDC²⁻. Adicionalmente, duas bandas intensas em 1633cm⁻¹ e em 1398 cm⁻¹ são atribuídas aos modos ν_{asym}(COO⁻) e ν_{sym}(COO⁻), respectivamente, indicando a coordenação através dos grupos carboxilatos do ligante.

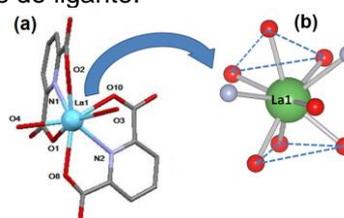


Figura 2: (a) Fragmento estrutural do polímero de coordenação, (b) primeira esfera de coordenação do íon La(III).

Conclusões

Este trabalho revela a síntese, caracterização espectroscópica e estrutura cristalina de um novo polímero de coordenação de La(III) envolvendo o ânion 2,6-piridinodicarboxilato (2,6-PDC²⁻).

Agradecimentos

UFJF, FAPEMIG, CAPES, CNPQ.

[1] Kanatt, S. R. et. al., 2007, Wang, G. et. al., 2010, Kirillov, E. et. al., 2004, Kostova, I. et. al., 2004.

[2] Marques, L. F.; Marinho, M. V.; Speziali, N. L.; Visentin, L. D. C.; Machado, F. C. Inorganica Chimica Acta, 2011, v. 365, p. 454-457.