

Estrutura Cristalina de um Novo Polímero de Coordenação 1-D de Cu(II) Contendo o Ligante 4,4'-Bipiridina e Ânions 3-Tiofenóacetato.

Lippy Faria Marques^{1*} (IC), Nivaldo L. Speziali² (PQ), Flávia C. Machado¹ (PQ) e Wagner M. Teles^{1†} (PQ).

† In memoriam

e-mail: lippyquimicauff@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Campus Universitário Martelos, Juiz de Fora - MG, 36036-330. ²Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, Campus Pampulha, Belo Horizonte-MG, 31270-901.

Palavras Chave: polímeros de coordenação, Carboxilatos de Cu(II) e 4,4'-Bipiridina.

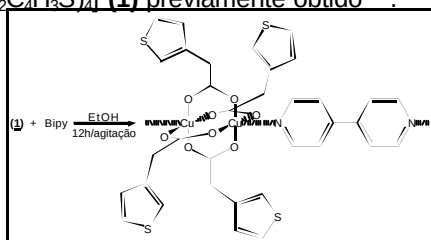
Introdução

Uma grande variedade de estruturas inorgânicas auto-organizadas são construídas através de interações apropriadas metal-ligante ou interações fracas como ligações de hidrogênio e π - π stacking, gerando vários tipos de estruturas poliméricas 1-D, 2-D e 3-D⁽¹⁾. Recentemente compostos dessa natureza vem sendo sintetizados e intensamente estudados em virtude da grande versatilidade nos modos de coordenação do ânion carboxilato na formação de redes supramoleculares auto-organizadas⁽²⁾.

Em particular a 4,4'-Bipiridina (Bipy) é um ligante nitrogenado rígido que pode atuar em ponte entre dois sítios metálicos⁽³⁾. No presente trabalho reportamos a estrutura cristalina de um novo polímero de coordenação 1D de Cu(II) $[\text{Cu}_2\mu\text{-(O}_2\text{CCH}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{S)}_4(\text{Bipy})]_n$ contendo os ligantes 3-Tiofenoacetato e Bipy.

Resultados e Discussão

O esquema abaixo apresenta a rota de síntese para o polímero em estudo a partir de seu precursor $[\text{Cu}_2\mu\text{-(O}_2\text{CCH}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{S)}_4]$ (**1**) previamente obtido^(2b).



Monocristais do $[\text{Cu}_2\mu\text{-(O}_2\text{CCH}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{S)}_4(\text{Bipy})]_n$ foram obtidos a partir de uma solução de DMSO, os quais foram utilizados na coleta de dados para determinação estrutural por difração de raios X.

Este composto cristaliza no sistema ortorrômbico e grupo espacial Fdd2, cuja célula unitária é: $a = 16,609(5)$ Å; $b = 30,203(8)$ Å; $c = 13,945(4)$ Å.

Verifica-se que cada centro metálico de Cu(II) adota uma geometria de pirâmide de base quadrada na qual a base é formada pelos oxigênios do grupo carboxilato e a posição apical ocupada por um

nitrogênio proveniente do ligante 4,4'-Bipiridina, bem como o modo de coordenação em ponte simétrica (*syn, syn*: μ_2 : μ_2) do grupo carboxilato como pode ser visualizado pela Figura 2.

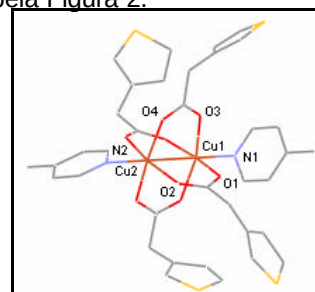


Figura 2- Unidade de repetição do polímero (**2**)

Os ligantes 4,4'-Bipiridina atuam em ponte entre os sítios de Cu(II) conectando as unidades Cu_2O_8 originando uma cadeia polimérica que se estende na direção do eixo cristalográfico *c* como mostra a Figura 3.



Figura 3- Polímero se estendendo sobre o eixo cristalográfico *c*.

Adicionalmente observa-se que os anéis piridínicos do ligante nitrogenado não são coplanares apresentando um ângulo de torção de aproximadamente 43°.

Conclusões

Este trabalho reporta a síntese e o estudo cristalográfico de um novo polímero 1-D de Cu(II).

Agradecimentos

UFJF, CNPq e FAPEMIG.

¹A.J. Blake.; et al. *Coord.Chem.Rev.*, **1999**, 183, 117.

² ^aYaghi, O. M. et al *Acc. Chem. Res.* **2001**, 34, 319. ^bMarinho M.V.; Yoshida, M.I.; Guedes, K.J.; Krambrock, K.; Bortoluzzi, A.J.;

Hörner,M.; Machado,F.C.; Teles,W.M.; *Inorg.Chem.*, **2004**, 43, 1539.

³Castillo, O. *et al. Inorg. Chem. Commun.* **2003**, 803