

# Síntese e Estrutura Cristalina de um Complexo de Zn(II) Contendo o Ligante Nitrogenado Ancilar Sulfeto de di(2-piridila) e Íons Cloreto.

Luciano H. Chagas<sup>1\*</sup> (IC), Renata Diniz<sup>1</sup> (PQ), Luiz Fernando C. de Oliveira<sup>1</sup> (PQ) e Flávia C. Machado<sup>1</sup> (PQ). [pedra16@yahoo.com.br](mailto:pedra16@yahoo.com.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química-ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora - MG, 36036-330.

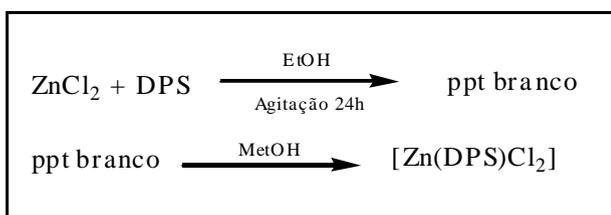
*Palavras Chave:* ligantes nitrogenados ancilares, complexos de zinco, estrutura cristalina.

## Introdução

O estudo de complexos de metais de transição com ligantes heterocíclicos tem atraído grande interesse na química de coordenação pela potencial construção de estruturas supramoleculares. Essas estruturas, baseadas em metais de transição e ligantes orgânicos multidentados, podem apresentar propriedades químicas e físicas muito interessantes sob diversos pontos de vista, possibilitando sua aplicação em óptica, eletrônica, catálise, materiais microporosos e outras<sup>1</sup>. Dependendo da natureza do metal e do comportamento do ligante, pode-se desenvolver estratégias de síntese para favorecer a formação de um determinado arranjo cristalino<sup>2</sup>. Neste contexto o ligante sulfeto de di(2-piridila) (DPS) tem sido utilizado na formação de blocos construtores em compostos de coordenação. Além disso, o DPS é intensamente pesquisado por sua atividade biológica<sup>3</sup> e propriedades luminescentes<sup>4</sup>. No presente trabalho reportamos a estrutura cristalina e espectros vibracionais do complexo dicloro(sulfeto de di(2-piridila))zinco(II) [Zn(DPS)Cl<sub>2</sub>] previamente sintetizado por Black<sup>5</sup>.

## Resultados e Discussão

O composto em estudo foi preparado como mostra o esquema:



O espectro IV do composto apresenta 4 bandas de absorção  $\nu_{CC/CN}$ , entre 1585-1420 cm<sup>-1</sup> que estão deslocadas para maiores números de onda em relação ao ligante livre, indicando a coordenação do DPS ao centro metálico através dos nitrogênios piridínicos. Em 1096 cm<sup>-1</sup> encontra-se uma banda de baixa intensidade referente ao  $\nu_{CS}$  e uma forte absorção em torno de 776 cm<sup>-1</sup> atribuída a  $\delta_{CH}$ . Estes resultados são consistentes com os obtidos por espectroscopia Raman, sendo o aspecto mais importante a presença da banda de alta intensidade

em 1025 cm<sup>-1</sup> referente ao modo de respiração do anel aromático. As bandas  $\nu_{ZnCl}$   $\nu_{ZnN}$  foram observadas em torno de 300 cm<sup>-1</sup>.

Este composto cristaliza no sistema monoclinico e grupo espacial P2<sub>1</sub>/c, cuja célula unitária é: a = 12,2406(6) Å; b = 7,6923(4) Å; c = 14,2997(5) Å e  $\beta$  = 110,641(3)°. O refinamento final de 147 parâmetros utilizando 2090 reflexões independentes [ $F_o > 2\sigma(F_o)$ ] apresentou R = 0,0507, wR = 0,0890 e S = 1,086. O átomo de zinco apresenta geometria tetraédrica ligeiramente distorcida coordenado a dois átomos de nitrogênio do DPS, formando quelato, e a dois íons cloreto de forma terminal, como pode ser observado na Figura 1. As distâncias médias Zn-N e Zn-Cl são respectivamente 2,054(3) e 2,213(1) Å. Os anéis piridínicos são planos e formam um ângulo de 50,8(1)° entre si. A distância média C-S é de 1,771(4) Å e o ângulo C-S-C é de 104,0(2)°.

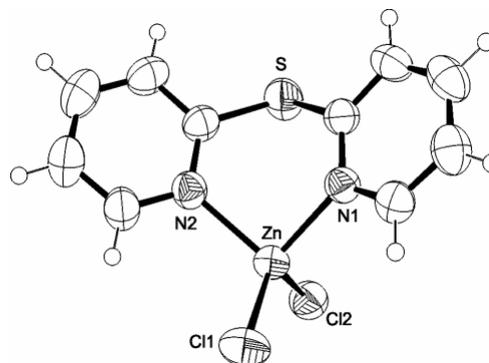


Figura 1. Estrutura cristalina do Zn(DPS)Cl<sub>2</sub>.

## Conclusões

Os resultados obtidos comprovam a formação do composto denominado [Zn(DPS)Cl<sub>2</sub>], onde o sítio metálico apresenta geometria tetraédrica distorcida. O átomo de zinco coordena-se a dois átomos de nitrogênio do ligante DPS formando quelato, e a dois íons cloreto.

## Agradecimentos

BIC-UFJF, FAPEMIG e aos Laboratórios de Espectroscopia Molecular (IQ-USP) e Cristalografia (IFSC-USP).

<sup>1</sup> Nather, C. *et al. Chem. Mater.* **2002**, 14, 4536. <sup>2</sup> Le, T. W. *et al. Polyhedron* **2004**, 23, 999. <sup>3</sup> Teles, W. M., *et al. Transition*

*Sociedade Brasileira de Química ( SBQ)*

*Met.Chem* **1999**, 24, 321 .<sup>4</sup> Muthu, S., *et al. Inorganica Chimica Acta* **2005**, 358, 595 .<sup>5</sup> Black, D. St. C., *Aust. J. Chem.* **1967**, 20, 2101.

---