

Síntese e Estudos Espectroscópicos de Compostos de Cu(II) com Ligante Nitrogenado 1,3-bis (4-piridil) propano e Íons Esquarato.

Charlane C. Corrêa^{1*} (PG), Luciano H. Chagas¹ (IC), Wagner M. Teles^{1†} (PQ), Maria I. Yoshida² (PQ), Renata Diniz¹ (PQ), Luiz Fernando C. de Oliveira¹ (PQ), Flávia C. Machado¹ (PQ).

[†]in memoriam

charcorrea@gmail.com.br

¹Departamento de Química-ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora - MG, 36036-330.

²Departamento de Química-ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte-MG, 31270-901

Palavras Chave: ligantes nitrogenados, oxocarbonos, complexos de cobre.

Introdução

Atualmente, a química supramolecular tem atraído o interesse devido à potencial aplicação de novos compostos em óptica, eletrônica, catálise e materiais microporosos¹.

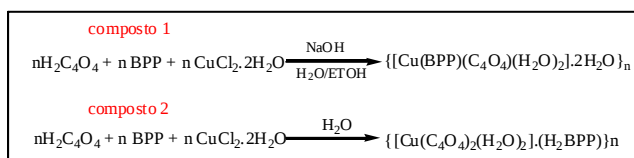
Os oxocarbonos são compostos cíclicos de fórmula geral $C_nO_n^{2-}$ e se caracterizam por alta simetria, deslocalização eletrônica e capacidade coordenante². Em especial, o íon esquarato ($C_4O_4^{2-}$) pode se coordenar em ponte a diferentes metais através dos átomos de oxigênio pelas posições 1,2 ou 1,3 ou dos quatro átomos de oxigênio.

O ligante 1,3-Bis(4-piridil)propano (BPP) tem sido muito utilizado na construção de polímeros de coordenação, devido a sua flexibilidade³, podendo adotar diversas conformações.

No presente trabalho reportamos a síntese e caracterização dos compostos de cobre(II) contendo o ligante BPP e íon esquarato, denominados: $\{[Cu(BPP)(C_4O_4)(H_2O)_2] \cdot 2H_2O\}_n$ e $\{[Cu(C_4O_4)_2(H_2O)_2] \cdot (H_2BPP)]\}_n$.

Resultados e Discussão

Os compostos em estudo foram preparados como mostram os esquemas:



C, 45,90 ; H, 4,99 ; N, 6,30%. Observado: C, 44,42 ; H, 4,78 ; N, 6,48%. Para $C_{21}H_{20}N_2CuO_{10}$ (**2**): Calculado: C, 48,14 ; H, 3,82 ; N, 5,35%. Observado: C, 46,79 ; H, 3,91 ; N, 4,70%. Esses resultados concordam com a obtenção de um composto de estequiometria (1:1:1/ Cu^{+2} :BPP: $C_4O_4^{2-}$) para (**1**) e (1:1:2/ Cu^{+2} :BPP: $C_4O_4^{2-}$) para (**2**).

A curva TG para (**1**) apresenta cinco perdas de massa, sendo que a primeira em 80° C e a segunda em 170° C

podem ser atribuídas a quatro moléculas de água, duas de cristalização e outras duas de coordenação. Já a curva do composto (**2**), apresenta três perdas de massa, sendo a primeira em 225° C referente a duas moléculas de água coordenadas, a segunda em 280° C atribuída a BPP protonada, e a terceira em 345° C referente aos dois esquaratos.

O espectro IV do composto (**1**) apresenta bandas de absorção $\nu_{CC/CN}$, originalmente em 1605 cm^{-1} no ligante livre, deslocadas para maiores números de onda (1621 cm^{-1}), indicando a coordenação do BPP ao centro metálico através dos nitrogênios piridínicos. Em 1535 cm^{-1} encontra-se ν_{CO} referente ao ligante esquarato deslocado para maiores números de onda em relação ao ligante livre (1520 cm^{-1}). Estes resultados são consistentes com os obtidos através da espectroscopia Raman, sendo o aspecto mais importante a presença da banda de alta intensidade em 1769 cm^{-1} referente ao ν_{CO} do esquarato não coordenado, descartando a possibilidade do íon se coordenar de modo bis-bidentado. O composto (**2**) apresenta bandas $\nu_{CC/CN}$ deslocada para maiores números de onda em 1509, 1488, 1462 cm^{-1} e deformação δ_{NH} referente a BPP protonada em 1638 cm^{-1} indicando que esta não está coordenada ao sítio metálico, mas sim em rede. Já o esquarato tem seu estiramento $\nu_{CC/CO}$ deslocado para 1540 cm^{-1} indicando a coordenação do íon, e no Raman, observamos uma banda em 1783 cm^{-1} relacionada ao CO não coordenado. Esses dados são comprovados pela difração de Raios X de monocristal.

Conclusões

Os resultados obtidos comprovam a formação do composto (**2**) denominado $\{[Cu(C_4O_4)_2(H_2O)_2] \cdot (H_2BPP)]\}_n$, onde os ligantes esquarato encontra-se de modo monodentado e o BPP em rede. A caracterização do composto (**1**) indica a formação de $\{[Cu(BPP)(C_4O_4)(H_2O)_2] \cdot 2H_2O\}_n$, sendo que neste caso os ligantes esquarato e BPP estão coordenados de modo monodentado.

Agradecimentos

UFJF, FAPEMIG e Laboratório de Espectroscopia Molecular (IQ-USP).

¹ Le, T. W. *et al. Polyhedron* **2004**, 23, 999. ² Oliveira, L. F. C. *et al. Química Nova* **1992**, 15, 55. ³ Teles, W. M., *et al. Inorg. Chem.* **2004**, 43, 1539.
