

Análise Estrutural de um Polímero de Coordenação de Zinco com Ligante Benzil(fenil)fosfinato.

Rubia M. Siqueira da Silva (PG)* e Robert Burrow (PQ)

rubiasm@mail.ufsm.br

Laboratório de Materiais Inorgânicos – Departamento de Química – Universidade Federal de Santa Maria

Palavras Chave: *polímeros, fosfinatos, raios X*

Introdução

Uma grande variedade de compostos está sendo desenvolvida e amplamente utilizada na aplicação de novos materiais, dentre estes, destacam-se os compostos do tipo organoxifosforados, devido as suas aplicações como filmes magnéticos, sólidos porosos e óptica não linear.¹ O ácido benzil(fenil)fosfínico é um exemplo de composto do tipo organoxifosforado, e foi utilizado como ligante neste trabalho. Compostos semelhantes baseados em difenilfosfinatos de zinco e de mercúrio foram estudados por Lippard² e Burrow³, respectivamente, e serviram de base para este estudo. Neste trabalho, será descrita a caracterização de um novo ligante do tipo fosfinato e sua complexação com íon Zn^{2+} .

Resultados e Discussão

O ácido benzil(fenil)fosfínico (**1**) foi sintetizado de acordo com a reação de Boyd⁴. Este ligante pode atuar como bidentado, através dos dois átomos de oxigênio, e apresenta-se semelhante a um carboxilato, como mostra a Figura 1. Observam-se ligações de hidrogênio entre as moléculas, que ocorrem através dos átomos $H(1) \cdots O(2)^a$, com distâncias de 1,59(2) Å, e ângulo de ligação para $O(1)-H(1) \cdots O(2)^a$ igual a 151,93(14)°, estas ligações formam cadeias na direção do eixo *a*. As distâncias P=O e P-O são 1,512(2) Å e 1,543(2) Å, respectivamente. Reagindo-se o ácido benzil(fenil)fosfínico com acetato de zinco(II) em metanol sob atmosfera inerte, resulta-se no complexo *catena*- $Zn[O_2(C_6H_5)PCH_2(C_6H_5)]_2$ (**2**). O composto no estado sólido gera um polímero de coordenação unidimensional, formando cadeias na direção cristalográfica *c*, como mostra a Figura 2. Na estrutura do complexo, cada molécula do ligante coordena com dois íons Zn^{2+} , ocorrendo a formação de pontes duplas entre os centros metálicos, sendo essa uma das formas mais comuns de coordenação deste tipo de ligante. O íon Zn^{2+} possui geometria tetraédrica distorcida, formada por quatro átomos de oxigênio provenientes de quatro moléculas do ligante, com ângulos entre 99,98(2)° a 118,45(3)°, e as distâncias Zn-O situam-se entre 1,9230(2) a 1,9373(3) Å. Os dados cristalográficos das estruturas (1) e (2) são: [**1**: ortorrômbico, $P2_12_12_1$, $a = 5.7334(2)$ Å, $b = 12.3443(3)$ Å, $c = 16.7808(5)$ Å; $R_1 = 0.0404$, $wR_2 = 0.1133$, **2**: ortorrômbico, $Pbcn$, $a = 12.2370(9)$ Å, $b = 25.044(2)$ Å, $c = 16.0465(12)$ Å; $R_1 = 0.0702$, $wR_2 = 0.1266$]

Å, $b = 12.3443(3)$, $c = 16.7808(5)$ Å; $R_1 = 0.0404$, $wR_2 = 0.1133$, **2**: ortorrômbico, $Pbcn$, $a = 12.2370(9)$ Å, $b = 25.044(2)$ Å, $c = 16.0465(12)$ Å; $R_1 = 0.0702$, $wR_2 = 0.1266$]

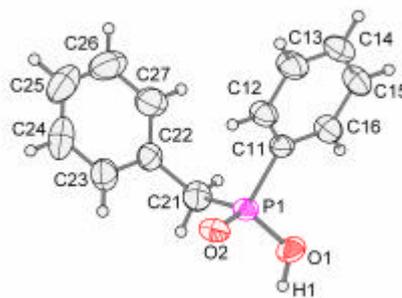


Figura 1: Estrutura do composto 1 [$Ph_2PCH_2O_2H$].

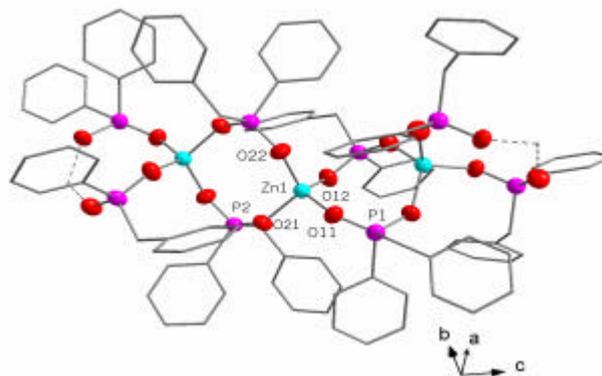


Figura 2: Estrutura do composto 2 [$Zn(Ph_2PCH_2O_2)_2$].

Conclusões

Neste trabalho, foi sintetizado um novo ligante do tipo fosfinato, e, a partir dele um novo polímero de coordenação de Zn^{2+} foi sintetizado. A estrutura deste composto apresenta-se em cadeia. Novos complexos envolvendo este ligante estão sendo sintetizados.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS, FINEP.

¹ Silva, R. S.; Siqueira, M.R. e Burrow, R. A. "Novo Polímero de coordenação de Bário com Ácido Fosfínico", XIII SBQ-Sul, **2005**.

² He, C. D.; e Lippard, S. J. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 184.

³ Siqueira, M. R.; Tonetto, T. C.; Rizzatti, M. A.; Lang, E. S.; Ellena, J e Burrow, R.A. *Inorg. Chem. Comm.* **2006**, 9, 537.

⁴ Boyd, E.A e Loh, V.M, *Tetrahedron.* **1996**, 37, 1651.