

## Estrutura tridimensional de um polímero de cobre(II) gerada pela coordenação em ponte de um carboxilato em forma de “v”

Alexandre de O. Legendre (PG)\*<sup>1</sup>, Adriano dos Santos (IC)<sup>1</sup>, Gislaïne A. da Cunha (IC)<sup>1</sup>, Vânia M. Nogueira (PQ)<sup>1</sup>, Eduardo E. Castellano (PQ)<sup>2</sup> e Antonio E. Mauro (PQ)<sup>1</sup>.

1- Instituto de Química de Araraquara – UNESP – Araraquara – SP

2- Instituto de Física de São Carlos – USP – São Carlos - SP

\* aolegendre@yahoo.com.br

Palavras Chave: Complexos de Cobre (II), Polímeros de Coordenação, Dicarboxilatos.

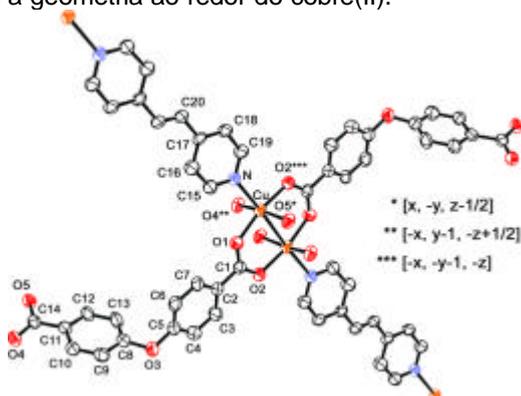
### Introdução

A busca por materiais capazes de mimetizar compostos porosos, como as zeólitas naturais, tem crescido recentemente, e muitos cientistas apostam no uso de complexos metálicos, uma vez que é possível associar a diversidade de geometrias de coordenação do metal central com espaçadores orgânicos de tamanhos variados, de modo a modular a estrutura desejada. Neste âmbito, o cobre(II) destaca-se por sua versatilidade, podendo assumir um grande número de geometrias<sup>1</sup>. Concomitantemente, carboxilatos podem coordenar-se de várias formas a este metal, expandindo ainda mais o leque de possibilidades estruturais<sup>2</sup>. Neste estudo apresentamos a síntese e caracterização cristalográfica do polímero  $[\text{Cu}_2(\text{obb})_2(\text{bpe})]_n$ , (obb=4,4'-oxibis(benzoato) e bpe=trans-1,2-bis-(4-piridil)eteno).

### Resultados e Discussão

O composto foi sintetizado da seguinte forma:  $\text{CuCl}_2$ ,  $\text{H}_2\text{obb}$ , bpe e KOH foram adicionados na proporção de 2:2:1:2 a uma mistura 1:1 de água e etanol e a suspensão resultante foi aquecida em um reator de aço-inox a 160°C por 1 dia. O reator foi aberto e os cristais foram lavados com água, etanol e secos em dessecador (rendimento 50%).

A estrutura do complexo foi determinada por difração de raios-X de monocristal e a figura 1 mostra a representação ORTEP de sua unidade assimétrica com a geometria ao redor do cobre(II).

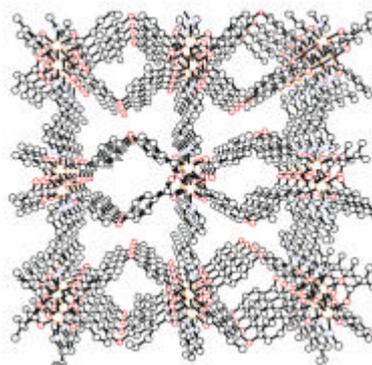


**Figura 1.** Representação ORTEP da estrutura do complexo. Os átomos de hidrogênio são omitidos.

A esfera de coordenação ao redor de cada átomo de cobre(II) é octaédrica, constituída por quatro átomos de oxigênio de quatro grupos carboxilatos nas posições equatoriais e um átomo de nitrogênio do ligante piridínico e outro átomo de cobre nas posições axiais. A média das distâncias das ligações Cu-O, de 1,967 Å, e o valor de 2,153 Å da ligação Cu-N são comparáveis àqueles usualmente encontrados em outros complexos de cobre(II) com carboxilatos e aminas. O comprimento da ligação Cu-Cu, 2,656 Å, é próximo ao valor de 2,64 Å que ocorre no acetato de cobre(II), confirmando a ligação metal-metal.

### Conclusões

Na estrutura deste composto, dois átomos de cobre são ligados por quatro átomos de oxigênio de quatro grupos carboxilatos, resultando em estruturas do tipo gaiola. Cada grupo carboxílico pertence a um ligante obb distinto e liga duas destas gaiolas, e cada ligante bpe também atua como ponte entre gaiolas adjacentes, levando à formação de um polímero tridimensional, mostrado na figura 2.



**Figura 2.** Visão do polímero ortogonal ao eixo b.

### Agradecimentos

À Capes e ao CNPq pelo suporte financeiro.

<sup>1</sup> Shit, S.; Chakraborty, J.; Das, A.; Yap, G.P.A.; Fallah, M.S.E. e Mitra, S.; *Struct. Chem.* **2007**, *18*, 317.

<sup>2</sup> Moncol, J.; Mudra, M.; Lönneck, P.; Hewitt, M.; Valko, M.; Morris, H.; Svorek, J.; Melnik, M.; Mazur, M. e Koman, M; *Inorg. Chim. Acta* **2007**, *360*, 32113.