

Estrutura Cristalina de um complexo de Cu(II) com Ligante Nitrogenado 4,4'- dimetil – 2,2'- bipyridina.

Weberton R. do Carmo^{1*} (IC), Daniella M. de Faria¹ (PG), Flavia C. Machado¹ (PQ) e Renata Diniz¹ (PQ)
webertonreis@yahoo.com.br

¹Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular (NEEM), Departamento de Química ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora – MG, 36036-330.

Palavras Chave: *estrutura cristalina, ligantes nitrogenados.*

Introdução

Nos últimos anos a Química Inorgânica Supramolecular tem sido uma área frequentemente investigada devido às novas topologias estruturais obtidas e a potencial aplicação de novos compostos em catálise, óptica e magnetismo.¹

Sendo importante o controle de formação de polímeros de coordenação de duas e três dimensões tem-se utilizado a aproximação de blocos construtores para a construção da estrutura desejada.

O ligante planar 4,4'- dimetil – 2,2'- bipyridina (Mebpy) possui dois átomos de nitrogênio com caráter mais básico do que análogos da 2,2'- bipyridina e assume o modo de coordenação bidentado, deste modo tem sido muito utilizado na química de coordenação.²

Nesse trabalho reportamos a estrutura cristalina do complexo de Cu(II) contendo o ligante Mebpy, denominado [CuCl(Mebpy)₂]Cl.3H₂O (CMO).

Resultados e Discussão

O composto CMO foi sintetizado a partir da reação de CuCl₂, Mebpy, Na₂C₂O₄, na proporção de 1:1:1/2.³

O CMO foi obtido na terceira filtração, onde alguns cristais azul-claros foram formados. Um monocristal de dimensões 0,40 x 0,25 x 0,20 mm foi escolhido para análise de difração de Raios X. Esta análise foi realizada no equipamento BRUKER, KAPPA CCD à temperatura ambiente e radiação KaMo (0,71073Å). O refinamento da estrutura foi feito utilizando-se os programas XPREP, XS e XL.⁴

O composto cristalizou-se no sistema triclinico e grupo espacial P $\bar{1}$, cuja célula unitária é, a = 7.662(1) Å, b = 13.419(4) Å, c = 14.345(4) Å, α = 74.331(2)°, β = 89.468(2)°, γ = 89.524(2)° e volume igual a 1420.03(5) Å³.

O refinamento final de 322 parâmetros utilizando 3997 reflexões independentes [$F_0 > 4\sigma(F_0)$] apresentou R = 0.067, WR = 0.178 e S = 1.02.

A Figura 1 mostra a estrutura cristalina do composto CMO.

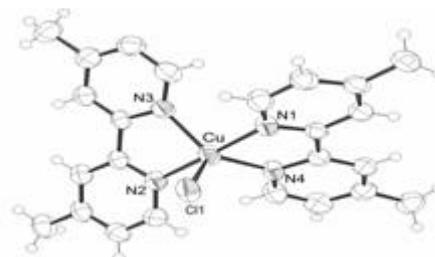


Figura 1. Estrutura Cristalina CMO

A partir da análise de difração pode-se verificar que nesse cristal não há a presença de íons oxalato. Através da Figura 1, verifica-se o Cu ligado a dois ligantes nitrogenados e a um cloreto na geometria bipirâmide trigonal, confirmado pelo valor de $\tau = 0,92$. A base da pirâmide é formada por um átomo de cloro e dois nitrogênios de ligantes distintos, sendo o ângulo entre os planos contendo os ligantes nitrogenados de 52,04°. A distância média Cu-N e Cu-Cl1, são respectivamente 2.0665(4)Å e 2.358(2)Å. A neutralidade do composto é obtida pela presença de um doreto não coordenado ao metal presente na estrutura. Este cloreto encontra-se desordenado em dois sítios cristalográficos, cuja ocupação foi fixada em 0,5.

Conclusões

Os resultados obtidos comprovam a formação do composto CMO, no qual a partir da terceira filtração já não se verifica a presença de oxalato. O átomo de Cu apresenta geometria bipirâmide trigonal ligeiramente distorcida, sendo a base da pirâmide formada por um átomo de cloro e dois nitrogênios de ligantes distintos.

Agradecimentos

UFJF, FAPEMIG, LDRX do Instituto de Física da UFF pelas medidas de difração.

¹D.Venkataraman, G.B. Gardner, S. Lee, J.S. Moor, J.Am. Chem.Soc.**1995**, *117*, 11600.

²A.M. Madalan, et all, Inorg.Chim. Acta **2004**, *357*, 4151.

³D.M. de Faria, et all, Polyhedron, **2007**, *26*, 4525 – 4532.

⁴G.M. Sheldrick, SHELXTL/PC, Structure Determination Software Programs, Siemens Analytical X- ray Instruments Inc, Madison, Wisconsin, USA, 1990.