

Estrutura Cristalina de um Complexo de Cu(II) com Ácido 2,3-Pirazinodicarboxílico

Márcia C. de Souza^{1*}(IC), Luciano H. Chagas¹(IC) e Renata Diniz¹(PQ)

marciaphn@gmail.com

¹Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular (NEEM), Departamento de Química ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora – MG, 36036-900.

Palavras Chave: estrutura cristalina, ácidos carboxílicos, polímeros de coordenação.

Introdução

Nos últimos anos a Química Supramolecular tem se tornado uma área de pesquisa cada vez mais investigada, atingindo e consolidando o desenvolvimento da interface entre química, física e biologia.¹

Esta nova área de estudos procura entender as forças intermoleculares responsáveis pela estabilidade de compostos no estado sólido, ou seja, as forças que governam o empacotamento cristalino. Neste campo, estudos de determinação de estrutura cristalina desses complexos são de extrema importância, pois a partir desta é possível não só identificar ligações químicas entre átomos como também estudar as forças intermoleculares existentes do ponto de vista quali e/ou quantitativo.

Nesse trabalho reportamos a estrutura cristalina do complexo polimérico de Cu(II) com Ácido 2,3-Pirazinodicarboxílico (PDC) $\{Cu[C_4H_2N_2(COO)_2]\}_n$ (CuPDC).

Resultados e Discussão

O composto CuPDC foi sintetizado a partir da reação de $CuCl_2$ e o ácido 2,3-pirazinodicarboxílico, na proporção de 1:1 em etanol e água (1:1). Após alguns dias observou-se a formação de alguns cristais verdes. Um monocristal de dimensões 0,09 x 0,12 x 0,12 mm foi escolhido para análise de difração de raios x. Esta análise foi realizada no equipamento BRUKER, KAPPA CCD à temperatura ambiente e radiação $K\alpha Mo$ (0,71073 Å). O refinamento da estrutura foi feito utilizando-se os programas XPREP, XS e XL.²

O composto cristalizou-se no sistema monoclinico e grupo espacial C2/c, cuja célula unitária é, $a=11,590(2)$ Å, $b=7,553(2)$ Å, $c=7,462(2)$ Å, $\beta=93,898(3)^\circ$ e volume igual a $651,68(5)$ Å³.

O refinamento final de 62 parâmetros utilizando 465 reflexões independentes [$F_o > 4\sigma(F_o)$] apresentou $R=0,078$, $WR=0,208$ e $S=1,05$.

Através da Figura1, verifica-se que o Cu está coordenado a quatro átomos de oxigênio e dois de nitrogênio do PDC dando origem a uma geometria octaédrica distorcida (distorção tetragonal).

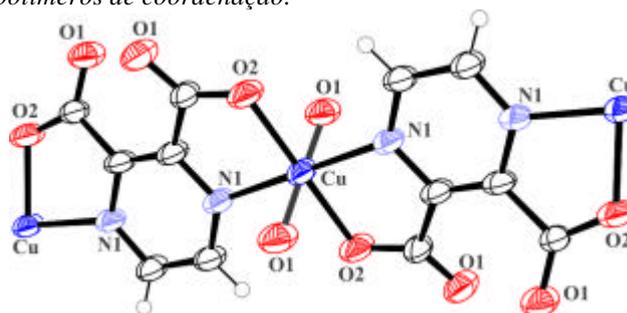


Figura 1. Estrutura cristalina do composto CuPDC.

Nas posições equatoriais encontram-se dois átomos de nitrogênio do anel pirazínico e dois átomos de oxigênio de moléculas distintas do PDC. As distâncias Cu-N1 e Cu-O2 são respectivamente 1,991(7) e 1,951(4)Å. Na posição axial a distância Cu-O1 é de 2,491(5)Å confirmando a distorção tetragonal da geometria octaédrica em torno do átomo de Cu.

O grupo carboxilato não é coplanar ao anel pirazínico sendo o ângulo de torção de 19,4°. Os grupos carboxilatos estão distorcidos um em relação ao outro de 37,9°. O átomo de Cu está a 0,20Å do plano do anel pirazínico. A interação metal-ligante no composto CuPDC dá origem a um polímero de coordenação bidimensional (2D). Uma dimensão estende-se paralela à diagonal *ac* e a outra perpendicular à mesma diagonal.

Conclusões

Os resultados obtidos comprovam a formação do complexo de coordenação CuPDC. O átomo de Cu apresenta geometria octaédrica distorcida dando origem a um polímero 2D estabilizado apenas pelas ligações metal-ligante.

Agradecimentos

UFJF, FAPEMIG, LDRX (IF-UFF).

¹J.-M. Lehn, *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*, VHC, Weinheim, 1995. ²G.M. Sheldrick, *SHELXTL/PC, Structure Determination Software Programs*, Siemens Analytical X ray Instruments Inc, Madison, Wisconsin, USA, 1990.