

Síntese, Caracterização e Estrutura Cristalina de um Polímero de Coordenação 3D $\{[\text{Mn}_3(\text{BPP})_{4,5}(\text{BTC})_{1,5}(\text{H}_2\text{O})_5] \cdot 4\text{H}_2\text{O}\}_n$ Envolvendo os Ligantes BPP (1,3 – Bis(4-piridil)propano) e o Íon Carboxilato BTC (1,2,4,5- benzenotetracarboxilato).

Charlane C. Corrêa^{1*} (PG), Renata Diniz¹ (PQ), Flávia C. Machado¹(PQ). *charcorrea@gmail.com

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: Polímeros de coordenação, Química Supramolecular, Ligante Nitrogenado, Policarboxilatos.

Introdução

Atualmente, a química supramolecular tem atraído o interesse devido a potencial aplicação de novos compostos em óptica, eletrônica, catálise e materiais microporosos¹. Assim, têm-se usado diversos ligantes nitrogenados, compostos orgânicos, tais como policarboxilatos e ácidos inorgânicos para explorar diferentes tipos de polímeros de coordenação assim como as mais distintas propriedades químicas e físicas e suas devidas aplicações.

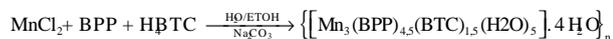
O ligante 1,3-Bis(4-piridil)propano (BPP) tem sido muito utilizado na construção de polímeros de coordenação, devido a sua flexibilidade², podendo adotar diversas conformações.

Os carboxilatos têm recebido muita atenção, por serem versáteis exibem diferentes modos de coordenação ao cátion metálico³ e ainda diferentes conformações.

No presente trabalho reportamos a síntese e caracterização do composto de Mn(II) contendo o ligante BPP e íons carboxilato, denominado $[\text{Mn}_3(\text{BPP})_{4,5}(\text{BTC})_{1,5}(\text{H}_2\text{O})_5] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$.

Resultados e Discussão

O composto em estudo foi preparado como mostra a equação abaixo.



Após alguns dias foram obtidos cristais incolores, com rendimento de 38%. O composto foi devidamente caracterizado e sua estrutura determinada por difração de raios X. As medidas de difração de raios-X por monocristal foram realizadas no aparelho Bruker Kappa CCD com radiação MoK_α e temperatura ambiente. O composto cristaliza-se no sistema triclinico e grupo espacial $\text{P}\bar{1}$, cujos parâmetros da célula unitária são: $a = 11,347(5) \text{ \AA}$, $b = 11,787(11) \text{ \AA}$, $c = 21,203(18) \text{ \AA}$ e $\alpha = 96,27(8)^\circ$, $\beta = 90,96(7)^\circ$ e $\gamma = 108,25(5)^\circ$. Os parâmetros estatísticos obtidos no refinamento final utilizando as 12041 reflexões independentes são $R(F) =$

0,0792; $wR(F^2) = 0,1537$ e $S = 1,019$. Assim o composto supracitado é um polímero tridimensional possuindo três cátions metálicos cristalograficamente independentes e os ligantes carboxilato e BPP conectados a esses sítios formando uma geometria octaédrica. O ligante BPP encontra-se conectado nos modos mono e bidentado e em duas conformações: TT e GG'. A união de oito sítios metálicos dão origem a uma grade retangular que se estende infinitamente, sendo que os quatro vértices deste retângulo contém um carboxilato tetracoordenado (Figura 1) sendo as principais distâncias iguais a : $\text{Mn-O}_{\text{tetra}} = 2,165 \text{ \AA}$, $\text{Mn-O}_{\text{agua}} = 2,219 \text{ \AA}$ e $\text{Mn-N} = 2,298 \text{ \AA}$.

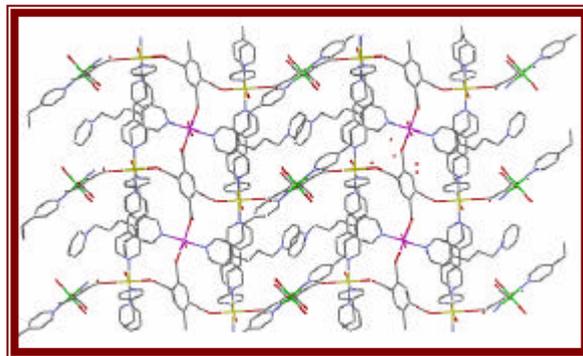


Figura 1. $[\text{Mn}_3(\text{BPP})_{4,5}(\text{BTC})_{1,5}(\text{H}_2\text{O})_5] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ em um arranjo 3D.

Conclusões

Os dados cristalográficos comprovam a formação do polímero 3D $\{[\text{Mn}_3(\text{BPP})_{4,5}(\text{BTC})_{1,5}(\text{H}_2\text{O})_5] \cdot 4\text{H}_2\text{O}\}_n$, onde o ligante BPP encontra-se coordenado aos sítios metálicos nos modos mono e bidentado e o ligante carboxilato de modo tetradentado.

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Renato G. Bastos (IF/UFF) por disponibilizar o difratômetro e a UFJF e FAPEMIG pelo apoio financeiro.

¹Le, T. W., *et al. Polyhedron* **2004**, *23*, 999.²Carlucci, L. *et al. Inorg. Chem.*, **1997**, *36*, 3812.³Teles, W. M., *et al. Inorg. Chem.* **2004**, *43*, 1539.