

## Estudo espectroscópico e estrutura cristalina de um novo complexo de Ni(II) contendo o ligante MBP e o íon croconato.

Elgte Elmin B. De Paula<sup>1\*</sup> (PG), Victor Hugo F. Bernardes (IC)<sup>1</sup>, Maria Clara R. Freitas (IC)<sup>1</sup>, Renata Diniz<sup>1</sup> (PQ), Luiz Fernando C. de Oliveira<sup>1</sup>(PQ) e Flávia C. Machado<sup>1</sup>(PQ).

e-mail: [elgteelmin@yahoo.com.br](mailto:elgteelmin@yahoo.com.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química, ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Campus Universitário Martelos, Juiz de Fora - MG, 36036-330.

Palavras Chave: complexo de Ni(II), ligante 4,4'-dimetil-2,2'-bipiridina e íon croconato.

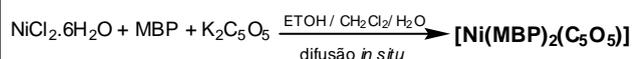
### Introdução

O estudo de compostos de coordenação envolvendo moléculas que contenham grupamentos carbonílicos em sua estrutura, tem se difundido muito devido à potencial aplicação em óptica, eletrônica e catálise. Neste contexto merece destaque a família dos oxocarbonos (compostos cíclicos de fórmula geral  $C_nO_n^{2-}$ ), a qual vem despertando interesse em virtude de suas características peculiares tais como: estruturas planas altamente simétricas, sistemas  $\pi$ -deslocalizados, espectros eletrônicos não usuais e uma forte capacidade coordenante frente a metais de transição<sup>1</sup>.

No presente trabalho são descritas a síntese, caracterização espectroscópica e estrutura cristalina do composto de Ni(II) contendo o ligante rígido bidentado 4,4'-dimetil-2,2'-bipiridina (MBP) e o íon croconato ( $C_5O_5^{2-}$ ). Este íon oxocarbônico apresenta simetria  $D_{5h}$  e grande versatilidade nos modos de coordenação o que o torna um promissor constituinte na síntese de compostos com estruturas e topologias definidas, formando arranjos supramoleculares<sup>2,3</sup>.

### Resultados e Discussão

O esquema abaixo exhibe a metodologia sintética utilizada para obtenção do composto em estudo.



O ligante MBP é disponível comercialmente, enquanto a espécie oxocarbônica foi obtida de acordo com procedimento descrito na literatura<sup>4</sup>.

Após um dia foram obtidos 48 mg de um sólido cristalino de coloração verde musgo, com rendimento de 34,8%.

Os resultados espectroscópicos, IV e Raman, sugerem a coordenação do ligante MBP pelos átomos de nitrogênio ao centro metálico, através do deslocamento da banda  $\nu(CC-CN)$  de  $1600\text{ cm}^{-1}$  no ligante livre para  $1627\text{ cm}^{-1}$  no complexo. Já a coordenação do íon croconato ao sítio de Ni(II) foi indicada pela presença de uma banda de absorção em  $1709\text{ cm}^{-1}$  atribuída ao  $\nu(CO)$  e de bandas na região de  $559$  a  $578\text{ cm}^{-1}$  referente à deformação do

anel oxocarbônico. Os dados cristalográficos obtidos por difração de raios X de monocristal confirmam as indicações dos estudos espectroscópicos. A elucidação da estrutura cristalina evidenciou que o complexo estudado cristaliza-se no sistema triclinico e grupo espacial  $I2/a$ , revelando se tratar de um composto de coordenação com a presença de dois ligantes MBP e de um íon croconato, coordenados ao metal pelo modo bidentado formando uma geometria octaédrica (Figura 1). A estrutura do composto é estabilizada por interação  $\pi-\pi$  fraca entre os anéis piridínicos da MBP (Fig. 2), sendo as principais distâncias médias de ligação: Ni-N=  $2,068\text{ \AA}$  e Ni-O=  $2,136\text{ \AA}$ .

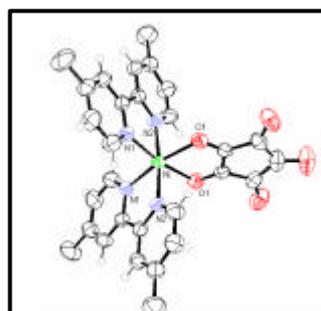


Fig. 1: Representação da unidade assimétrica do  $[Ni(MBP)_2(C_5O_5)]$ .

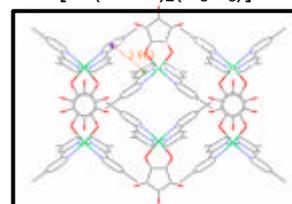


Fig. 2: Empacotamento cristalino do  $[Ni(MBP)_2(C_5O_5)]$ .

### Conclusões

Os dados espectroscópicos e cristalográficos comprovaram a coordenação do ligante nitrogenado MBP e do íon croconato ao íon Ni(II), evidenciando a obtenção de um novo composto de coordenação.

### Agradecimentos

FAPEMIG, LDRX (IF-UFF).

<sup>1</sup>De Oliveira, L. F. C. *et al. Química Nova* **1992**, *15*, 55-61.

<sup>2</sup>Wang, C-C. *et al. Inorg. Chem.*, **2003**, *42*, 8294-8299.

<sup>3</sup>Teles, W.M. *et al. Polyhedron*, **2007**, 26, 8469- 8469-8475.

<sup>4</sup>a) Seitz, G.; Imming, P.; *Chem. Rev.*; **1992**, 92, 1227-1260.

b) Morris, R. M. *et al. J. Am. Chem. Soc.*, **1983** , 105, 2633-2639.