

Síntese e caracterização estrutural de três polímeros de coordenação isoestruturais com o novo ligante fenil(flouren-9-il)fosfinato.

Rubia M. Siqueira da Silva (PG)^{*}, Robert A. Burrow (PQ).

*E-mail: rubia.ufsm@gmail.com

Laboratório de Materiais Inorgânicos – Departamento de Química – Universidade Federal de Santa Maria.

Palavras Chave: fluoreno, estrutura cristalina, metais divalentes.

Introdução

Polímeros de coordenação contendo o grupo fluoreno ($C_{13}H_9$) podem apresentar um elevado rendimento quântico de fluorescência,¹ dando uma particular relevância para novos materiais devido a suas excelentes propriedades química, óptica e eletrônica. Tendo em vista essas características foi sintetizado nesse trabalho um novo ligante, fenil-(fluoreno-9-il)fosfinato (Figura 1), contendo o grupo fluoreno, com o objetivo de se obter polímeros de coordenação fluorescentes.

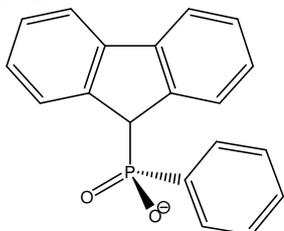


Figura 1. Representação do ligante fenil(flouren-9-il)fosfinato.

Resultados e Discussão

Os três polímeros de coordenação isoestruturais de fórmula $[M\{(Ph)(C_{13}H_9)PO_2\}_2]$ em que $M=Cd$ **1**, Zn **2** ou Mn **3**, foram sintetizados por reações hidrotermais a partir do sal do metal e do pró-ligante ácido fenil(flouren-9-il)fosfínico, obtidos em rendimentos em torno de 90% de uma mistura de pó e cristais. Os três compostos foram caracterizados por raios-X de pó, ponto de fusão e por espectroscopia de I.V.

Os parâmetros de cela determinados a partir dos cristais dos três compostos são quase idênticos. As estruturas cristalinas dos compostos **1** e **2** foram determinadas e confirmadas como isoestruturais. Dado a similaridade dos parâmetros de cela, além das demais técnicas de caracterização, o composto **3** provavelmente é isoestrutural a **1** e **2** (Tabela 1). A análise de Rietveld da difração de raios-X de pó dos componentes dos produtos em forma de pó produziu parâmetros de cela similares aos determinados por difração de raios-X de monocristal dos cristais, mostrando a homogeneidade dos produtos, exemplificado pelo composto **1** na Figura 2.

As estruturas cristalinas de **1** e **2** consistem de cadeias infinitas, que se estendem ao longo da direção cristalográfica [001], formadas de átomos metálicos, com geometria de coordenação tetraédrica, conectados por pontes de dois grupos fosfinatos, Figura 3.

Tabela 1. Dados cristalográficos dos compostos.

Compostos	1	1 Rietveld	2	3
Sistema cristalino	ortorrômbico	ortorrômbico	ortorrômbico	–
Grupo espacial	<i>Pccn</i>	<i>Pccn</i>	<i>Pccn</i>	–
<i>a</i> (Å)	25,778(4)	25,732(2)	25,689(5)	25,962(3)
<i>b</i> (Å)	27,282(6)	27,217(2)	26,863(6)	27,056(9)
<i>c</i> (Å)	9,034(5)	9,0111(9)	8,997(8)	9,097(13)

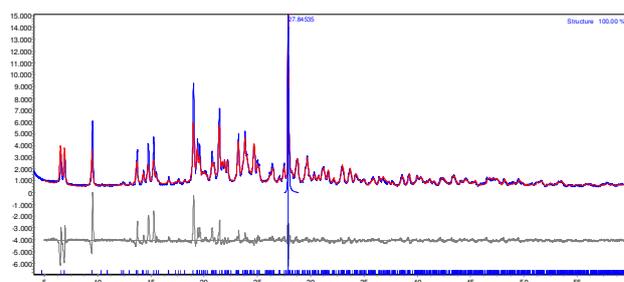


Figura 2. Resultado da análise de Rietveld da amostra **1**.

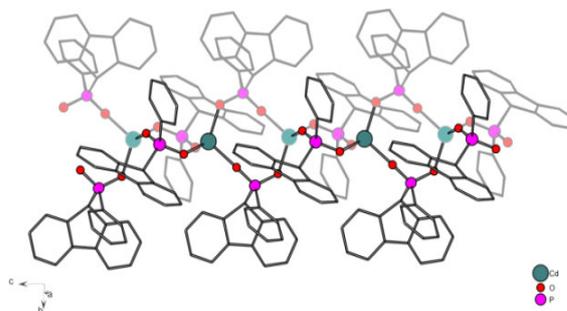


Figura 3. Estrutura do composto $Cd(PhC_{13}H_9PO_2)_2$, **1**.

Conclusões

Neste trabalho foi sintetizado um novo ligante do tipo fosfinato contendo o grupo fluoreno, e, a partir dele três compostos isoestruturais foram obtidos. Pretende-se, em breve, investigar as propriedades de fluorescência destes compostos.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS, FINEP.

¹ Ding, J.; Day, M.; Robertson, G.; Roovers, J. *Macromolecules*. **2002**, *35*, 3474.