

Síntese e caracterização espectroscópica de complexos de Co(II) e Zn(II) com o ácido 1,2,3 - benzenotricarboxílico.

Weberton R. do Carmo^{1*}(IC) , Renata Diniz¹ (PQ).

webertonreis@yahoo.com.br

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

Palavras Chave: ácido 1,2,3-benzenotricarboxílico, espectroscopia.

Introdução

Tem se conseguido um rápido aperfeiçoamento para a construção de polímeros metal – orgânico policarboxilato por sua envolvente característica estrutural e propriedades físico – químicas. Algumas investigações tem dado atenção a polímeros de coordenação que contenham ácidos benzeno policarboxilatos rígidos e assimétricos como o ácido 1,2,3-benzenotricarboxílico (H₃BT). Dentre as características estruturais dos ácidos benzeno policarboxilatos destaca-se a alta assimetria que favorece a formação de moléculas supramoleculares¹. A diferença de frequências (Δ) entre os modos de estiramento simétrico [$v_{sim}(\text{COO})$] e assimétrico [$v_{ass}(\text{COO})$] dos grupos carboxilatos pode ser utilizada na identificação do tipo de coordenação em complexos metálicos de mesmo ligante. O valor de Δ , para complexos metálicos com o mesmo ligante, é maior em compostos coordenados do que em compostos iônicos².

Resultados e Discussão

Os complexos de Co e Zn foram sintetizados a partir da reação hidrotérmica dos sais de CoCl₂.6H₂O e ZnCl₂ com Na₂CO₃, H₃BT, na proporção de (1:1:1). Para a síntese hidrotérmica a rampa utilizada consistiu de um aquecimento até 160°C em 45 minutos, permanecendo desse modo durante 7 horas, seguida de um resfriamento à temperatura ambiente com duração de 40 horas.

O complexo de Co cristalizou-se no sistema triclinico e grupo espacial $P\bar{1}$, cuja célula unitária é, a=6,6607(6) Å, b=6,6795(7) Å, c=16,3716(16) Å, $\alpha=93,093(2)^\circ$, $\beta=92,494(3)^\circ$, $\gamma=117,750(2)^\circ$ e volume igual a 641,72(12) Å³. O refinamento final com 191 parâmetros utilizando 3051 reflexões independentes [$F_0 > 2\sigma(F_0)$] apresentou R =0,045, wR = 0,115 e S = 1,16. A Figura 1 mostra a estrutura cristalina desse complexo.

Para compostos coordenados de maneira monodentada, o valor de Δ é maior do que em compostos com coordenação bidentada ou que formam quelatos, e o mesmo decresce com a diminuição da força de coordenação².

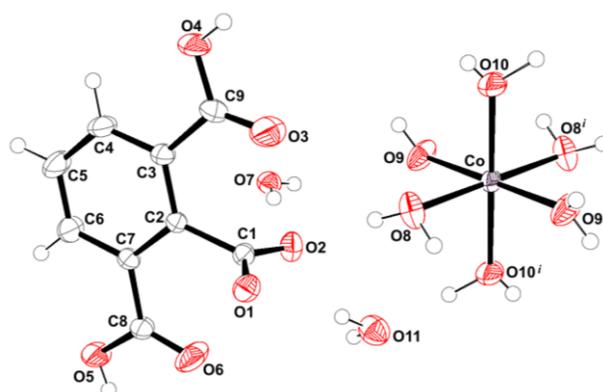


Figura 1. Estrutura Cristalina do complexo de cobalto. Código de simetria i' : -x, -y, -z.

De acordo com a Tabela 1, os valores de Δ para os sais de Co(II) e Zn(II) são semelhantes, sugerindo que o complexo de Zn tenha estrutura semelhante ao complexo de Co (Figura1).

Tabela 1. Frequências vibracionais para os modos de estiramento dos grupos carboxilatos

	Hidrot. Co	Hidrot. Zn
$v_{sim}(\text{COO})$	1466	1466
$v_{ass}(\text{COO})$	1583	1584
$\Delta v(\text{COO})$	117*	118*

* metal menor interação com o ácido

Conclusões

Através dos resultados obtidos podemos concluir que os metais Co e Zn não se coordenaram ao ligante policarboxílico, indicando que a água é um ligante mais forte do que o ácido em questão.

Agradecimentos

UFJF, FAPEMIG e ao Laboratório de Cristalografia do DF-UFMG.

¹ B.Liu e L.Xu, *Inorg.Chem.Commun.* **2006**, *9*, 364-366.

² G.B.Deacon e R.J.Phillips, *Coord.Chem. Rev.* **1980**, *33*, 227-250.