

Estudos Espectroscópicos e Estruturais de Arranjos Supramoleculares Obtidos da Interação entre Co(II), Ácido Aminosalicílico e 4,4'-Bipiridina

Humberto C. Garcia^{*1} (PG), Ronaldo Toledo Cunha¹ (IC), Renata Diniz¹ (PQ) e Luiz Fernando Cappa de Oliveira¹ (PQ) betimquimica@yahoo.com.br

¹Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular (NEEM), Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, Campus Universitário Martelos, Juiz de Fora – MG, 36036-330.

Palavras Chave: Química Supramolecular, Espectroscopia Raman, Difração de Raios X.

Introdução

Durante muitos anos vários pesquisadores vêm tentando entender e interpretar a natureza da ligação química em um nível puramente molecular. Entretanto, nas últimas décadas verificou-se que muitos dos fenômenos presentes em sistemas químicos e biológicos ocorrem sem ao menos haver a quebra de uma ligação química. Como exemplo, podemos citar a dupla hélice do DNA, que interage entre si somente por fracas interações de hidrogênio que são desfeitas no processo de duplicação do material genético. Dentre as interações não-covalentes que fazem parte preponderante destes sistemas conhecidos como supramoleculares podemos citar as interações de hidrogênio, empacotamento π , forças de van der Waals, dentre outras. Neste contexto fica nítida a importância de se tentar compreender como estas interações ocorrem, e a síntese de novos compostos é de fundamental importância para o conhecimento de uma química dita como “além da molécula” [1].

Para síntese destes novos sistemas surge o ácido 4-aminosalicílico (HAS) (Fig.1), uma molécula interessante por possuir grupos doadores e receptores de prótons e propriedades na confecção de medicamentos. Outro composto utilizado é a 4,4'-bipiridina (bpy) (Fig.2), um ligante rígido com propriedades importantes em óptica não linear.

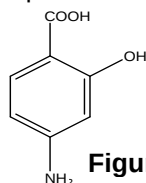


Figura 1. Ácido 4-aminosalicílico.

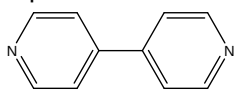


Figura 2. 4,4'-bipiridina.

Este trabalho consiste na síntese, caracterização espectroscópica e estrutural de complexos contendo o bpy, o ânion AS⁻ e o íon cobalto.

Resultados e Discussão

- A primeira síntese consistiu na reação por difusão do ácido aminosalicílico com a 4,4'-bipiridina.
- A segunda síntese consistiu na mistura entre o ácido aminosalicílico e a 4,4'-bipiridina com a posterior adição por difusão de uma solução de CoCl₂.

Para a primeira síntese o resultado de análise elemental revelou uma fórmula molecular mínima

igual a (bpy)(bpy)⁺AS⁻H₂O (**1**), confirmado através dos espectros infravermelho com bandas em 1641 cm⁻¹ ($\nu_{C=O}$) e 1597 cm⁻¹ (ν_{CC}/ν_{CN}) e Raman em 1625 cm⁻¹ ($\nu_{C=O}$) e 1598 cm⁻¹ (ν_{CC}/ν_{CN}), referentes ao ânion aminosalicílico (AS⁻) e ao cátion 4,4'-bipiridina (bpy⁺), respectivamente.

A difração de raios X mostrou a existência de uma interação de hidrogênio muito efetiva (Fig.2) entre os íons AS⁻, bpy⁺ e moléculas de água de hidratação, com a formação de uma cavidade preenchida no interior pelo ligante neutro bpy.

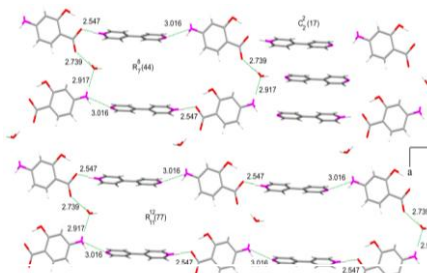


Figura 2. Arranjo bidimensional via interação de hidrogênio do complexo (1).

Para a segunda síntese o resultado de análise elemental revelou uma fórmula molecular mínima igual a ASCo(bpy)₂Cl.6H₂O (**2**), confirmado através dos espectros infravermelho com bandas em 1634 cm⁻¹ ($\nu_{C=O}$) e 1609 cm⁻¹ (ν_{CC}/ν_{CN}) e Raman em 1632 cm⁻¹ ($\nu_{C=O}$) e 1617 cm⁻¹ (ν_{CC}/ν_{CN}) referentes ao ânion aminosalicílico (AS⁻) e ao ligante 4,4'-bipiridina (bpy), respectivamente. A difração de raios X revelou a existência de interações supramoleculares, tais como empacotamento π , ligações de hidrogênio e do tipo C – H $\cdots$ π .

Conclusões

Este trabalho descreve a síntese de dois novos complexos denominados (bpy)(bpy)⁺AS⁻H₂O (**1**) e ASCo(bpy)₂Cl.6H₂O (**2**), que apresentaram interessantes interações supramoleculares como ligação de hidrogênio, empacotamento π , dentre outras, que contribuiu de modo preponderante na estabilidade cristalina dos complexos.

Agradecimentos

CAPES FAPEMIG CNPq LDRX(UFF-RJ) LabCri(UFMG)

^{*} Garcia, H. C.; Diniz, R.; Yoshida, M.I.; de Oliveira, L.F.C; CrystEngComm 2009, 11,881.