

Síntese e caracterização estrutural de três compostos com o ligante ditionato.

Jeverton W. Souza da Silva (IC)*, Juliano M. Rosa de Vicenti (PG), Robert A. Burrow (PQ).

*E-mail: jevertonsouza@gmail.com

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

Palavras Chave: ditionato, ligação de hidrogênio, monocristal.

Introdução

Sais de ditionatos são bem conhecidos, entretanto poucas de suas estruturas foram determinadas.¹ Suas estruturas têm o potencial para formar redes complexas no estado sólido dando estruturas interessantes.

Resultados e Discussão

Os três compostos de fórmulas $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{S}_2\text{O}_6)$ **1**, $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{S}_2\text{O}_6)$ **2** e $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{S}_2\text{O}_6)$ **3** foram sintetizados por reações de dupla troca, em meio aquoso, a partir do sulfato hidratado do metal e do ditionato de bário diidratado, obtidos por meio de cristalização em dessecador. Os três compostos foram caracterizados por difração de raios-X em monocristal, Tabela 1, e de pó, termo-análise, e por espectroscopia de I.V.

A estrutura cristalina do **1** é composta de um cátion $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ e um ânion ditionato, $\text{S}_2\text{O}_6^{2-}$. A geometria de coordenação principal do cátion é planar-quadrática, mas há interações com átomos de oxigênio do ditionato nas posições axiais, com a distância $\text{Cu}\cdots\text{O}$ de 2,3680(12) Å. Ligações de hidrogênio entre os átomos de hidrogênio das moléculas de água do cátion e os átomos de oxigênio do ânion criam uma rede tridimensional complexa, Figura 1.

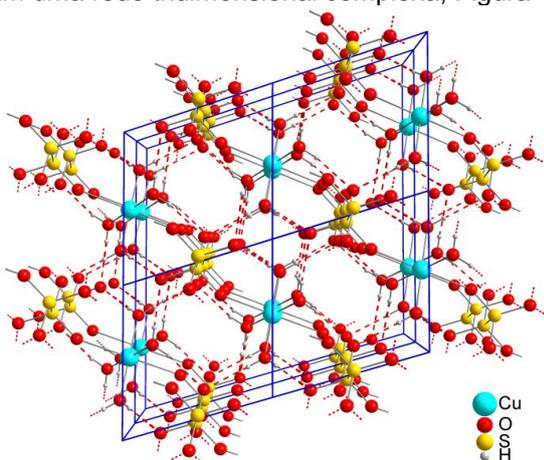


Figura 1. Estrutura do composto $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{S}_2\text{O}_6)$ **1**.

As estruturas cristalinas de **2** e **3** são isoestruturais e ambos consistem de um cátion: $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ e $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$, respectivamente, e um ânion ditionato. A geometria de coordenação principal dos dois cátions é octaédrica e também nestes; ligações de hidrogênio entre os átomos de hidrogênio das moléculas de água do cátion e os átomos de oxigênio do ânion criam uma rede tridimensional complexa, Figura 2.

culas de água dos cátions e os átomos de oxigênio do ânion criam uma rede tridimensional complexa, Figura 2.

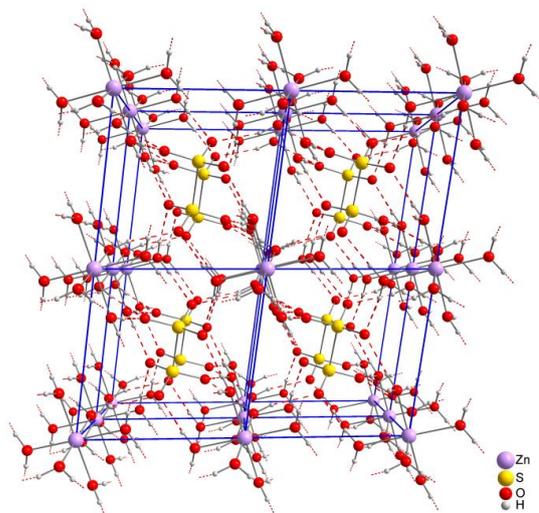


Figura 2. Estrutura do composto $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{S}_2\text{O}_6)$, **2**.

Tabela 1. Dados cristalográficos dos compostos.

Compostos	1	2	3
Fórmula	$\text{CuH}_8\text{O}_{10}\text{S}_2$	$\text{H}_{12}\text{O}_{12}\text{S}_2\text{Zn}$	$\text{H}_{12}\text{NiO}_{12}\text{S}_2$
Sistema cristalino	triclinico	triclinico	triclinico
Grupo espacial	$P-1$ (#2)	$P-1$ (#2)	$P-1$ (#2)
a (Å)	5,9765(2)	6,4356(2)	6,4344(2)
b (Å)	6,0886(2)	6,6761(3)	6,6754(3)
c (Å)	6,2753(3)	6,7416(3)	6,7448(3)
α (°)	106,007(2)	101,273(2)	101,238(2)
β (°)	102,407(2)	96,304(2)	96,316(2)
γ (°)	93,956(2)	94,650(2)	94,653(2)
V (Å ³)	212,36(19)	280,78(16)	280,86(15)
R_1	2,08%	2,84%	1,89%
wR_2	5,99%	7,58%	6,38%

Conclusões

As estruturas cristalinas inéditas de três compostos de ditionatos foram determinadas mostrando redes tridimensionais complexas no estado sólido.

Agradecimentos

FAPERGS, CNPq e FINEP.

¹(a) De Batt W. C., *Recl. Trav. Chim. Pays-Bas*, **45**, 237(1926). (b) Rausell-Com, J. A. e Garcia-Blanco, S., *Acta Crystallogr.*, **21**, 672(1966). (c) Leskelä, M. e Valkonen, J., *Acta Chem. Scand.*, **A**, **32**, 805(1978).