

Estudo estrutural do polímero de Cu(II) com o ácido 1,2,3-benzenotricarboxílico.

Weberton R. do Carmo^{1*} (PG), 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: Polímero de coordenação, difração de raios X de monocristais.

Introdução

A química supramolecular tornou-se foco de grande interesse científico nos últimos anos, visto que o entendimento das estruturas supramoleculares ajuda na compreensão de suas propriedades físico-químicas. Dentro desse contexto, encontram-se os polímeros de coordenação que possui uma ampla aplicação em diferentes áreas, tais como ótica, eletrônica, catálise, magnetismo, dentre outras.¹ O uso de ligantes policarboxilatos como o ácido 1,2,3-benzenotricarboxílico tem-se tornado útil, uma vez que esses compostos vem demonstrando serem ótimos auxiliares na construção de materiais organometálicos devido às diversas topologias de seus modos de coordenação. Esses compostos são conhecidos por apresentarem deslocalização eletrônica, sendo excelentes ligantes na química de coordenação. Dentre as características estruturais dos ácidos benzeno-policarboxilatos destaca-se a alta assimetria que favorece a formação de moléculas supramoleculares.² Nesse trabalho reportamos a síntese e o estudo estrutural do polímero de cobre com o ácido 1,2,3-benzenotricarboxílico (H₃BT).

Resultados e Discussão

A reação para a formação do complexo consistiu, primeiramente, na neutralização do H₃BT com Na₂CO₃ na proporção de (2:3), a partir do sal formado fez-se a reação com o sal de Cu(II). Após alguns meses, observou-se a formação de monocristais, que foram separados e analisados por difração de raios X. As medidas de difração foram realizadas em um equipamento BRUKER, KAPPA CCD à temperatura ambiente e radiação K α Mo (0,71073 Å). A estrutura foi resolvida pelo Método Direto e refinada pelo método dos mínimos quadrados (SHELX-97)³, no sistema WINGX⁴. O composto cristalizou-se no sistema triclinico, grupo espacial P1, cuja cela unitária é, $a = 10,205(1)$ Å, $b = 10,820(1)$ Å, $c = 12,3060(1)$ Å, $\alpha = 77,524(5)^\circ$, $\beta = 73,743(5)^\circ$, $\gamma = 89,201(5)^\circ$ e volume igual a 1272,1(2) Å³. O refinamento final de 741 parâmetros

utilizando 9430 reflexões [$F_0 > 2\sigma(F_0)$] apresentou $R = 0,0834$, $wR = 0,1441$ e $S = 1,020$. A Figura 1 apresenta a estrutura cristalina do complexo de Cu(II). É possível verificar através dos dados de difração que a desprotonação do ácido não ocorreu totalmente, visto que um ligante possui um grupo carboxílico. A presença de cinco átomos de Na e três de Cu confere a neutralidade do composto. O empacotamento cristalino acontece devido a interações de hidrogênio não convencionais do tipo C-H...O, ligações de hidrogênio intermolecular e intramolecular, além da interação de empacotamento π .

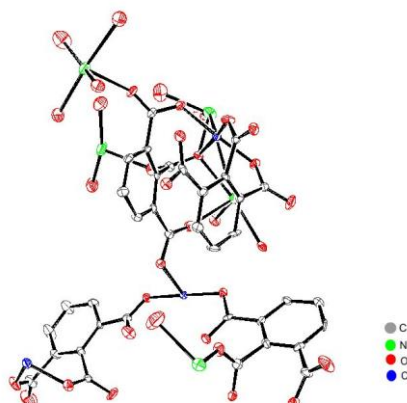


Figura 1. Unidade assimétrica do complexo.

Conclusões

A formação do polímero de coordenação é confirmada pelos dados de difração de raios X, onde sua neutralização é obtida por cinco átomos de Na e três de Cu.

Agradecimentos

UFJF, FAPEMIG, LDRX do Instituto de Física da UFF pelas medidas de difração.

¹D.Venkataraman, G.B. Gardner, S. Lee, J.S. Moor, J.Am. Chem.Soc.1995, 117, 11600.

²B.Liu e L.Xu, Inorg.Chem.Commun. 2006, 9, 364-366.

³G.M.,SHELDRICK., SHELXL-97 AND SHELXS-97; Program for Crystal Structure e Analysis. Univ.of.Göttingen,Göttingen, Germany (1997).

⁴L.J.,FARRUGIA.WinGX; A Windows Program for Crystal Structure Analysis. Scotland, University Os Glasgow (1997).