

## Estudos espectroscópicos e estruturais de dímeros de cádmio (II)

Bianca Barreto Martins<sup>1</sup> (PG)\*, Aline Locatelli<sup>2</sup> (PG), Anderson Almeida Dias<sup>1</sup> (IC), Adriano Bof de Oliveira<sup>3</sup> (PQ), Leandro Bresolin<sup>1</sup> (PQ), Vanessa Santana Carratú<sup>1</sup> (PQ).

\*biancabmartins@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Universidade Federal de Rio Grande RS/FURG

<sup>2</sup>Universidade Federal de Santa Maria RS/UFSM

<sup>3</sup>Universidade Federal de Sergipe SE/UFSE.

Palavras Chave: isatina-3-oxima, complexo de cádmio.

### Introdução

Durante as duas últimas décadas, a química de coordenação de oximas/ oximatos metálicos reaparece com aplicações potenciais em áreas como bioinorgânica e magneto-química. A vantagem indiscutível desta classe de ligantes orgânicos é a sua capacidade para coordenar o centro metálico de forma neutra ou desprotonada dando origem a espécies neutras ou carregadas o qual apresentam diferentes dimensões. Um grande número de revisões recentes sobre a química de oximas/ oximatos inclui as várias estratégias sintéticas e as suas aplicações analíticas.<sup>1</sup> Neste trabalho apresentamos dois complexos metálicos de cádmio (II) com o ligante isatina-3-oxima caracterizada por ponto de fusão, espectroscopia de infravermelho e difração raios-X em monocristais.

### Resultados e Discussão

A síntese dos complexos de cádmio ocorre mediante reação em etanol, nas proporções 2:1 e 3:1, do ligante com acetato de cádmio sob refluxo por 3 horas (esquema 01). Em um dos ensaios de cristalização adicionou-se dimetilformamida e no outro dimetilsulfóxido após a evaporação lenta dos solventes isolou-se cristais amarelos com PF>300°C para ambos. Na tabela 01, apresentamos as principais bandas do espectro na região do infravermelho do ligante isatina-3-oxima e dos seus complexos de cádmio.

Tabela 01: Principais bandas no IR.

Atribuição	Ligante (cm <sup>-1</sup> )	Complexos 1/2 (cm <sup>-1</sup> )
vC=N	1664, m	1681, m/1695,F
vN-O	1024, F	1026, f/1018,m
vO-H	2908, m	3192, F/3136,F
vC=O	1712, F	1714, m/1712,m
vN-H	3178, F	3192, F/3066,F

\*Onde:MF=muito forte,F=forte, m=médio, f=fraco.

Na comparação dos espectros do ligante e dos complexos de cádmio observam-se aumento nos números de onda para o vC=N e vC=O indicam o envolvimento do átomo de nitrogênio da azometina e do átomo de oxigênio do grupamento isatina na formação das ligações com o cátion cádmio (II).

Os dados cristalográficos do complexo 1 de fórmula geral [Cd<sub>2</sub>(C<sub>32</sub>H<sub>22</sub>N<sub>8</sub>O<sub>8</sub>)(CH<sub>3</sub>COO<sup>-</sup>)<sub>2</sub>(CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH)<sub>2</sub>].H<sub>2</sub>O conferem a estrutura sistema cristalino monoclinico, grupo espacial P2<sub>1</sub>n e Z=4.

34<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

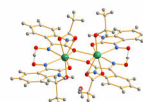


Figura 1: Projeção da estrutura cristalina e molecular do complexo 1. As elipsóides térmicas estão representadas com a probabilidade de 40%.

Os dados cristalográficos do complexo 2 de fórmula geral [Cd<sub>2</sub>(C<sub>48</sub>H<sub>34</sub>O<sub>12</sub>N<sub>12</sub>)].2H<sub>2</sub>O.2C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>S conferem a estrutura sistema cristalino monoclinico, grupo espacial P2<sub>1</sub>n e Z=6.

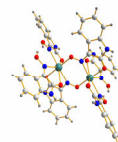


Figura 2: Projeção da estrutura cristalina e molecular do complexo 2. As elipsóides térmicas estão representadas com a probabilidade de 40%.

### Conclusões

O estudo espectroscópico de IR e de difração de raios-X em monocristal para os complexos de cádmio (II) com o ligante isatina-3-oxima, confirma a possibilidade do ligante coordenar como quelante, bem como atuar como ponte, de formas diferentes, os centros metálicos nas estruturas. Ambos os complexos apresentam estruturas binucleares onde os centros metálicos têm suas esferas de coordenação compostas por moléculas do ligante oxima em questão e uma delas ainda apresenta como ligantes moléculas de acetato e etanol. Desta forma fica evidente a importância do estudo estrutural, uma das várias formas de investigação e aplicação dos derivados de oximas.

### Agradecimentos

Lab. De Catálise e Síntese Inorgânica-EQA/FURG, CAPES, CNPq 125/08, FAPERGS 07/0127-6 e PPGQTA.

<sup>1</sup>Fornari, M.S.; Croitor, L.; Coropceanu, E.B.; Jeanneau, E.; Dementiev, I.V.; Goglidze, T.I.; Chumakov, Y.M., *Crystal Growth & Design*. 2009, 9, 5233-5243.

<sup>2</sup>Hudák, A.; Košturiak, A. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. 1999, 58, 579-587.