

Síntese e Estrutura Cristalina de um Complexo de Co(II) Contendo o Ânion 3,5-Piridinodicarboxilato.

Naiara P. Botezine^{1*} (IC), Victor H. F. Bernardes¹ (PG), Renata Diniz¹ (PQ) e Flávia C. Machado¹ (PQ).

*e-mail: naiarabotezine@hotmail.com

¹ Departamento de Química-ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora-MG, 36036-330, Brasil.

Palavras Chave: química supramolecular, ácido 3,5-piridinocarboxílico, Co(II)

Introdução

Durante muito tempo os estudos químicos se fundamentaram em entender a natureza em nível puramente molecular, considerando apenas estruturas e ligações covalentes. Somente nas últimas décadas foi iniciada a investigação das “fracas” ligações intermoleculares não-covalentes, focada no estudo de química para “além das moléculas”, o que possibilitou o surgimento de um novo campo de pesquisa denominado química supramolecular¹. Os piridinocarboxílicos são uma das classes de ligantes mais utilizadas na construção de arranjos supramoleculares². Este trabalho traz a síntese e caracterização de um complexo inédito com o ânion 3,5-piridinodicarboxilato (3,5-pdc), o íon da primeira série de transição Co(II) com o solvente DMSO presente na rede cristalina. Já é relatada na literatura³ uma estrutura semelhante com duas moléculas de água de rede substituindo o DMSO.

Resultados e Discussão

A síntese foi realizada pelo método de difusão. Os reagentes, numa proporção de 1:2 de Co(NO₃)₂·6H₂O e 3,5-pdc, respectivamente foram solubilizados nos solventes dimetilsulfóxido (DMSO), água e dimetilformamida.

Após 15 dias foram observados monocristais de coloração alaranjada. Anal. Elem. Cal: C, 27,56; H, 4,88; N, 3,57. Exp: C, 27,63; H, 4,65; N, 3,51.

O composto foi devidamente caracterizado por métodos termogravimétricos e espectroscópicos.

Uma banda em 1620 cm⁻¹ no espectro de IV do composto, deslocada para maior número de onda, quando comparada ao espectro do ligante livre (1605 cm⁻¹), sugere a coordenação do ligante ao metal pelo nitrogênio do anel piridínico. Em 1006 cm⁻¹, uma banda atribuída ao estiramento ν(S=O) indica a presença do solvente DMSO no complexo.

A estrutura foi determinada por difração de raios X por monocristal, e revela que o complexo, [Co(3,5-pdc)(H₂O)₅]DMSO, cristaliza-se no sistema monoclinico e grupo espacial P2₁/n (parâmetros estatísticos: R=0,0502; WR=0,1450; S=1,042).

O sítio metálico apresenta uma geometria octaédrica distorcida coordenado a cinco átomos de oxigênio provenientes de cinco moléculas de água e a um nitrogênio piridínico do ligante 3,5-pdc.

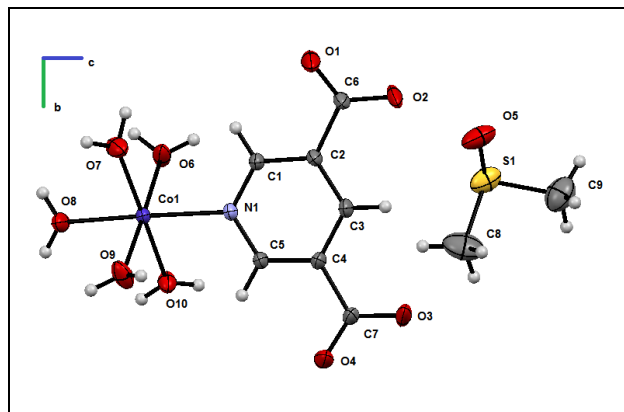


Figura 1. Célula unitária do [Co(3,5-pdc)(H₂O)₅]DMSO.

Uma molécula de DMSO pode ser observada no arranjo cristalino, concordando com os dados espectroscópicos, interagindo com o complexo por ligações de hidrogênio através do oxigênio do DMSO (O5) com oxigênios de duas águas coordenadas (O6 e O10), com as distâncias (O...O) 2,692 e 2,663 Å, respectivamente. Podem ser observadas também, na estrutura do complexo, interações do tipo empacotamento π, face to face, entre os anéis piridínicos, apresentando distância centróide-centróide de 3,803 Å e distância interplanar de 3,657 Å. Estas interações, de média intensidade, são responsáveis pela extensão tridimensional da rede cristalina.

Conclusões

Foram relatadas a síntese e caracterização de um novo complexo contendo o Co(II), o ânion 3,5-piridinodicarboxilato e o solvente DMSO.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPEMIG e UFJF. Ao LabCri (Departamento de Física – UFMG pela medida de difração de raios X).

¹ P.Teo; T.S. Andy Hor; *Coordination Chemistry*, **2011**, 255, 273-289.

² G.R.Desiraju; *Nature*, **2001**, 412, 397-400.

³ Y.L. Lu; J.Y. Wu; S.M. Huang; C.S. Lin; T.W. Chiu; Y.H. Liu; Y.S. Wen; C.H. Ueng; T.M.Chin; C.H. Hung; K.L. Lu; *Inorg. Chemistry*, **2006**, 45, 2430-2437.