

Difração de Raios X de Monocristal (DRXM) de compostos de coordenação de Cu (II)

Ana Karoline S. M. Valdo¹ (IC), Tamires Soares¹ (PG), Ramon Vilela¹ (PG), Danielle Cangussu¹ (PQ), Felipe T. Martins*¹ (PQ).

¹ Instituto de Química (IQ), Universidade Federal de Goiás (UFG), Campus Samambaia, Avenida Esperança, s/n Campus Universitário, Goiânia – GO, 74690-900.

* felipe@ufg.br

Palavras Chave: oxamato, cobre, difração

Abstract

Singlecrystal X-Ray Diffraction of Cu (II) coordination compounds (MXRD). These work report the determination and study of three new coordination compounds structures, using as tecquine Singlecrystal X-Ray Diffraction.

Introdução

Os compostos de coordenação em estudo podem ser apresentar propriedades magnéticas, atuando como magnetos moleculares, que surgiram como uma alternativa aos clássicos magnetos inorgânicos, entretanto para se compreender o magnetismo desses compostos se faz necessário a distância entres os centros metálicos na estrutura [1]. O objetivo desse trabalho é o estudo de estruturas monocristalinas que contém o ligante do tipo oxamato, por sua diversidade como ligante, utilizando a técnica de difração de Raios X de monocristal que se mostra eficiente na determinação das distância entre os centros metálicos.

Resultados e Discussão

Nesse trabalho foi possível determinar a estrutura cristalinas de três complexos inéditos, todos possuem a mesma unidade principal de ligante-metal $[Cu_2L_2]^+$, sendo o ligante L = metapiridinabisoxamato (figura 1).

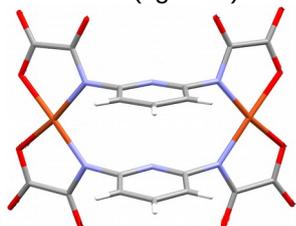


Figura 1. Bloco construtor dos compostos 1, 2 e 3.

A primeira estrutura possui fórmula mínima $[Na_6Cu_2(mpyba)_2(Cl)_2] \cdot 14H_2O$ (1), de grupo espacial **Pbcm**. A estrutura contém seis sódios diferentes e cobre em coordenação 5, pirâmide de base quadrada (figura 2).

A segunda estrutura de fórmula mínima $[Me_4N]_4[Cu_2(mpyba)_2(H_2O)_2] \cdot H_2O$ (2) pertence ao grupo espacial **C2/c** (figura 3), o cobre encontra-se em coordenação 5, do tipo piramidal de base quadrada destorcida.

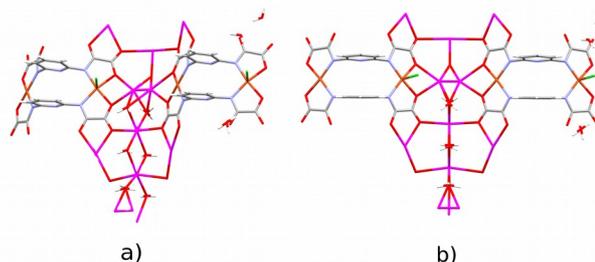


Figura 2. Representação do complexo 1, visões diferentes (a) lateral, (b) superior.

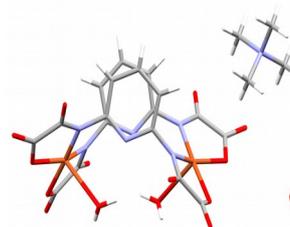


Figura 3. Estrutura do complexo (2), foram omitidas as outras três estruturas do tetrametilamônio.

A estrutura (3) de fórmula mínima $[Me_4N]_4[K_2Na_2Cu_4(mpyba)_4(H_2O)_{8.4}]$, pertence ao sistema cristalino ortorrômbico, grupo espacial **Cmca**, o cobre encontra-se em coordenação quadrado planar, formando um metalociclo (figura 4).

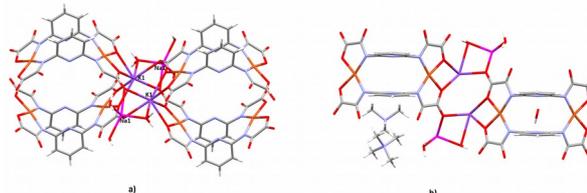


Figura 4. Estrutura do complexo (3), (a) lateral, (b) superior.

Conclusões

Foi possível a determinação estrutural de três compostos inéditos com estatística apropriada para confirmação da elucidação estrutural, possibilitando o posterior estudo de magnetismo pelo grupo de pesquisa do LabSim.

Agradecimentos

CNPQ, CAPES, IQ, IF, UFG, Labsim.

[1] ORCHARD, A.F.; Magnetochemistry. Pg. 1, 2 e 57. Oxford University Press: 2003.