

Preparação e Caracterização de uma nova Rede Polimérica Bimetálica contendo $\text{Ni}^{\text{II}}/\text{K}^{\text{I}}$ e o ânion 1,3-fenilenobis(oxamato).

Ludmila dos Santos Mariano^{1*} (IC), Wallace Doti do Pim² (PG), Humberto O. Stumpf² (PQ), Felipe Terra Martins³ (PQ), Antônio Carlos Doriguetto¹ (PQ) and Maria Vanda Marinho¹ (PQ).

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, Campus Sede, Alfenas, MG, 37130-000, Brasil.

²Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Campus Pampulha, Belo Horizonte, MG, 31270-901, Brasil.

³Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás, Campus Samambaia, Goiânia, Go, 74690-900, Brasil

*Email: luudmariano@gmail.com; maria.marinho@unifal-mg.edu.br

Palavras chave: rede polimérica, níquel(II), potássio(I), oxamato

Abstract

In this work entitled “Preparation and Characterization of an Unique Bimetallic Polymer Network Containing $\text{Ni}^{\text{II}}/\text{K}^{\text{I}}$ and the 1,3-phenylenebis(oxamate) Anion” we describe the preparation and characterization of a 3D polymer network.

Introdução

Um desafio para os cientistas envolvendo o campo da engenharia cristalina é o controle do modo de coordenação dos ligantes orgânicos em torno do centro metálico.¹ Parâmetros tais como solvente, temperatura, contra-íons e o método de síntese² são pontos importantes no processo de auto-organização. Dependendo do ajuste destes parâmetros, muitos diferentes compostos têm sido construídos a partir de uma mesma subestrutura.¹⁻² Assim, neste trabalho, nós apresentamos uma incomum rede polimérica formulada $\{[\text{Ni}_2(\text{mpba})_3\text{K}_2(\text{dmf})(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}\}_n$ (**1**), contendo o ânion parcialmente desprotonado $\text{H}_2\text{mpba}^{2-} = \text{N,N}'$ -1,3-fenilenobis(oxamato)] (Figura 1) atuando nos modos em ponte *syn-anti* e *monoatômica* através da porção carboxilato.

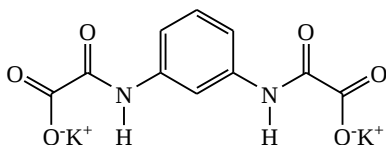
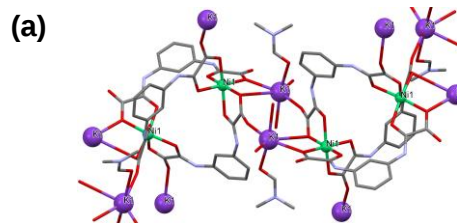


Figura 1- Representação esquemática do N,N'-1,3-fenilenobis(oxamato) de potássio ($\text{K}_2\text{H}_2\text{mpba}$).

Resultados e Discussão

1 foi preparado a partir de soluções de água/dimetilformamida (dmf) contendo $\text{K}_2\text{H}_2\text{mpba}$ e íons Ni^{2+} . Após duas semanas, cristais de **1** susceptíveis para difração de raios X de monocristal foram obtidos e filtrados com 75 % de rendimento. Dados de IV/cm^{-1} : 3507, 3447 ($\nu_{\text{O-H}}$), 3334, 3237 ($\nu_{\text{N-H}}$), 3333 ($\nu_{\text{C-Harom.}}$), 2925 ($\nu_{\text{C-H}}$) 1690, 1672, 1654, 1646 ($\nu_{\text{CO}} + \nu_{\text{aCOO}^-}$), 1600, 1556, 1545 ($\nu_{\text{C=C}}$), 1459, 1369 (ν_{sCOO^-}), 1309 ($\nu_{\text{C-N}}$) e 803, 755 ($\delta_{\text{C-H}}$), as quais confirmam a presença do ligante H_2mpba , moléculas de água e dmf.

A análise estrutural do composto **1** revela a formação de um núcleo dinuclear de níquel(II) $[\text{Ni}_2(\text{H}_2\text{mpba})_3]$ (ver Figura 2 a). Os dois íons de Ni^{II} exibem uma geometria octaédrica e cada centro metálico está ligado a seis átomos de oxigênio de grupos oxamatos. Cada íon de K^{I} também exibe uma geometria octaédrica.



Adicionalmente, os ligantes $\text{H}_2\text{mpba}^{2-}$ atuam nos modos em ponte *syn-anti* e *monoatômica* formando uma rede polimérica tridimensional de $\text{Ni}^{\text{II}}/\text{K}^{\text{I}}$ (ver Figura 2 b).

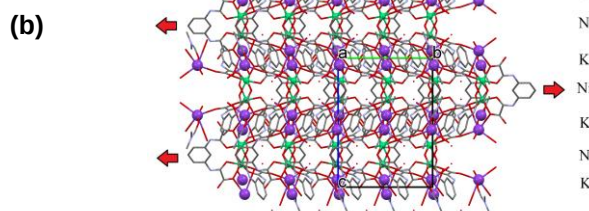


Figura 2. (a): esfera de coordenação e (b) empacotamento cristalino 3D de **1**.

Conclusão

Neste trabalho apresentamos pela primeira vez um rede polimérica do ânion $\text{H}_2\text{mpba}^{2-}$ conectando os centros metálicos de níquel(II) e potássio(I) com uma distância de 3,9814 (7) Å, o que encoraja-nos a estabelecer correlações entre a estrutura molecular e suas propriedades magnéticas.

Agradecimentos

Unifal-MG, Fapemig, CNPq, FINEP, CAPES, RQ-MG.

¹Lehn, J. M. *Supramolecular Chemistry, Concepts and Perspectives*, Wiley-VCH, Weinheim, **1995**. ²Oliveira, W. X. C., et al., *Cryst. Growth Des.*, **2015**, 15, 1325.