



XIV Seminário de Iniciação Científica
Universidade Federal de Juiz de Fora
15 a 17 de outubro de 2008



Área: Ciências Exatas e da Terra

Projeto: PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE POLÍMEROS DE COORDENAÇÃO DE COBRE (II) ENVOLVENDO BLOCOS CONSTRUTORES CONTENDO O LIGANTE NITROGENADOS E O ÂNION OXALATO

Orientador: Flávia Cavalieri Machado

Bolsistas:

DelmÁrcio Gomes Da Silva (XVI PIBIC)

Participantes:

Resumo:

Nos últimos anos, a construção de polímeros de coordenação através de íons de metais de transição e ligantes nitrogenados rígidos ou flexíveis tornou-se uma área de grande estudo por parte da Química Inorgânica Supramolecular.

Para a construção de uma rede polimérica tem sido aplicada a estratégia da utilização de blocos construtores. A literatura descreve diversos blocos construtores contendo ligantes nitrogenados ancilares que podem atuar no modo de coordenação quelato tais como a 2,2-bipiridina, 4,4-dimetil-2,2-bipiridina ou sulfeto de (2-piridila).

Nesse trabalho reportamos a preparação e caracterização de um novo bloco construtor de Cu(II) envolvendo o ligante 5,5-dimetil-2,2-bipiridina (5-Mebpy) e anions nitrato.

O composto em estudo foi sintetizado através da reação de difusão entre nitrato de cobre e o ligante nitrogenado. Após três dias, cristais azuis apropriados para análise por difração de raios X de monocristal foram isolados.

A curva termogravimétrica mostra uma primeira perda de massa em torno de 70 °C referente à saída de três moléculas de água e uma segunda em 279 °C atribuída à termodecomposição do complexo. A curva DSC acompanha esses resultados exibindo um evento endotérmico em 70 °C referente à desidratação e outro bastante exotérmico por volta de 280°C correspondente à decomposição do composto.

O espectro de infravermelho mostra uma banda larga centrada em 3446 cm⁻¹ referente ao estiramento OH de água, corroborando os dados de análise térmica.

Observa-se ainda que as bandas relativas aos modos de estiramento CC/CN no ligante livre (1599, 1555, 1468 cm⁻¹) encontram-se deslocadas para maiores números de onda no referido complexo (1610, 1578, 1474 cm⁻¹) sugerindo fortemente que o ligante 5-Mebpy está coordenado ao Cu(II) no modo quelato através dos nitrogênios piridínicos. Adicionalmente, uma banda de forte intensidade em 1384 cm⁻¹ indica a presença do íon nitrato no composto.

O composto teve sua estrutura determinada por difração de raios X de monocristal. O composto cristaliza no sistema monoclinico e grupo espacial C2/c. Verifica-se que o sítio de Cu(II) adota uma geometria de pirâmide de base quadrada, na qual a base é formada pelos átomos de nitrogênio piridínicos N1 e N2 do ligante 5-Mebpy e os oxigênios O1 e O3 de um íon nitrato e ligante aqua e posição apical é ocupada por uma molécula de água (O2). Em adição, o composto apresenta uma molécula de água de hidratação e um ânion nitrato como contra-íon.

Neste trabalho foi apresentada a síntese e caracterização do composto de cobre(II) que pode ser utilizado como bloco construtor na obtenção de polímeros de coordenação.