



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: SÍNTESE E CRISTALIZAÇÃO DE COMPLEXOS COM LIGANTES POLICARBOXÍLICOS

Orientador: Renata Diniz

Bolsistas:

Weberton Reis Do Carmo (IV ENXOVAL)

Participantes:

Estrutura Cristalina de um complexo de Cu(II) com Ligante Nitrogenado 4,4'- dimetil – 2,2'- bipyridina

Nos últimos anos a Química Inorgânica Supramolecular tem sido uma área freqüentemente investigada devido às novas topologias estruturais obtidas e a potencial aplicação de novos compostos em catálise, óptica e magnetismo (1). Sendo importante o controle de formação de polímeros de coordenação de duas e três dimensões tem-se utilizado a aproximação de blocos construtores para a construção da estrutura desejada. O ligante planar 4,4'- dimetil – 2,2'- bipyridina (Mebpy) possui dois átomos de nitrogênio com caráter mais básico do que análogos da 2,2'- bipyridina e assume o modo de coordenação bidentado, deste modo tem sido muito utilizado na química de coordenação (2). Nesse trabalho reportamos a estrutura cristalina do complexo de Cu(II) contendo o ligante Mebpy, denominado **CuCl(Mebpy)2Cl.3H2O** (CMO). O CMO foi sintetizado a partir da reação de CuCl₂, Mebpy, Na₂C₂O₄, na proporção de 1:1:1/2 (3). O CMO foi obtido na terceira filtração, onde alguns cristais azul-claros foram formados. Um monocristal foi escolhido para análise de difração de Raios X. Esta análise foi realizada no equipamento BRUKER, KAPPA CCD à temperatura ambiente e radiação (0,71073 angstroms). O refinamento da estrutura foi feito utilizando-se os programas XPREP, XS e XL (4). O composto cristalizou-se no sistema triclinico P-1, cuja célula unitária é, a = 7,662(1) angstroms, b = 13,419(4) angstroms, c = 14,345(4) angstroms, alfa = 74,331(2) graus, beta = 89,468(2) graus, gama = 89,524(2) graus e volume igual a 1420,03(5) angstroms cúbicos. O refinamento final de 322 parâmetros utilizando 3997 reflexões independentes apresentou R = 0,067, wR = 0,178 e S = 1,02. A partir da análise de difração pode-se verificar que nesse cristal não há a presença de íons oxalato. O átomo de Cu está ligado a dois ligantes nitrogenados e a um cloreto na geometria bipirâmide trigonal. A base da pirâmide é formada por um átomo de cloro e dois nitrogênios de ligantes distintos, sendo o ângulo entre os planos contendo os ligantes nitrogenados de 52,04 graus. A distância média Cu-N e Cu-Cl1, são respectivamente 2.0665(4) angstroms e 2.358(2) angstroms. A neutralidade do composto é obtida pela presença de um cloreto não coordenado ao metal presente na estrutura. Este cloreto encontra-se desordenado em dois sítios cristalográficos, cuja ocupação foi fixada em 0,5. Os resultados obtidos comprovam a formação do composto CMO, no qual a partir da terceira filtração já não se verifica a presença de oxalato.

1D.Venkataraman, G.B. Gardner, S. Lee, J.S. Moor, J.Am. Chem.Soc.1995, 117, 11600.

2A.M. Madalan, et all, Inorg.Chim. Acta 2004, 357, 4151.

3D.M. de Faria, et all, Polyhedron, 2007, 26, 4525 – 4532.

4G.M. Sheldrick, SHELXTL/PC, Structure Determination Software Programs, Siemens Analytical X- ray Instruments Inc, Madison, Wisconsin, USA, 1990.