

Síntese e estudo estrutural de um polímero de coordenação 1D composto pelo ácido 5-sulfoisoftálico, Isoniazida e o íon Zn^{2+}

Filipe Barra de Almeida*, Gabriel Brite Vieira. ¹Universidade Federal Fluminense (PQ), ²Universidade Federal Fluminense (IC)

filipebarra@id.uff.br

Universidade Federal Fluminense

Outeiro de São João Batista s/n, Campus do Valonguinho - Centro - Niterói / RJ -
Cep:24020-141

Departamento de Química Inorgânica – Lab 201

Palavras Chave: Polímeros de Coordenação, Difração de raios X.

Introdução

O estudo e síntese de estruturas de Polímeros de Coordenação têm servido de base para alcançar estruturas inéditas e com propriedades significativas para o uso tecnológico.

Por definição, Polímeros de coordenação são definidos como compostos de coordenação que apresentam entidades de coordenação repetitivas estendendo sua estrutura em uma, duas ou três dimensões [1].

Este tipo de composição, na maior parte das vezes em cristais, pode apresentar propriedades interessantes e poderosas em sua usabilidade, como exemplo, a formação de poros na estrutura, a presença de sítios ácidos de Lewis e Bronsted, etc. [1]. Estas propriedades podem proporcionar a aplicação destes polímeros de coordenação em várias áreas, tais como na adsorção de gases, catálise heterogênea, magnetismo molecular, etc.

Resultados e Discussão

Nesta síntese, foram utilizados os ligantes, Isoniazida (INH) e o sal de sódio do ácido 5-sulfoisoftálico (ASS), juntamente com o Nitrato de Zinco Hexahidratado.

Dessa forma, foram pesados 0,07 mmol de INH, 0,07mmol do Nitrato de Zinco e em um béquer, onde os mesmos foram solubilizados com 4 mL de H_2O sob agitação e aquecimento a $50^{\circ}C$. Em seguida, sob agitação, adicionou-se 1mL de solução aquosa com 0,07mmol do ASS, com uma pipeta. Ao atingir a temperatura de $72^{\circ}C$ o aquecimento e a agitação foram encerrados. Ao atingir a temperatura ambiente a solução final foi colada em repouso. Após 10 dias, foi observado a formação de cristais de coloração amarela.

Os cristais obtidos foram analisados por difração de raios X por monocristais e sua estrutura refinada (Figura 1) destacou a formação de um polímero de coordenação 1D (Figura 2) formado

pela coordenação de ambos os ligantes ao íon de Zn^{2+} . Observou-se que o íon Zn^{2+} adota geometria octaédrica ou tetraédrica em pontos distintos do cristal.

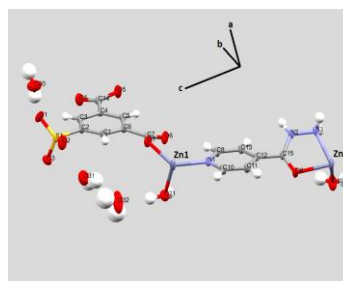


Figura 1. Unidade assimétrica do composto.

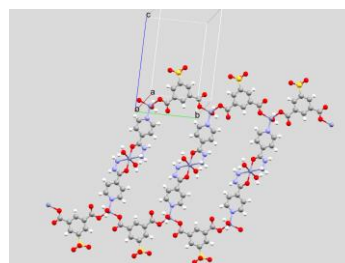


Figura 2. Polímero de coordenação unidimensional.

Conclusões

Conclui-se que a partir de sínteses racionalizadas entre os ligantes ASS e INH coordenados ao íon de Zn^{2+} foi possível a obtenção de um polímero de coordenação 1D, a partir do qual suas propriedades poderão ser estudadas e suas aplicabilidades testadas futuramente.

Agradecimentos

Agradecimentos especiais à UFF, a qual forneceu bolsas de desenvolvimento acadêmico para este projeto e ao LDRX, por ter cedido os equipamentos para a análise das amostras.

¹Batten, Stuart R.; Champness, Neil R.; Chen, Xiao-Ming; Garcia-Martinez, Javier; Kitagawa, Susumu; Öhrström, Lars; O'Keeffe, Michael; Suh, Myunghyun P.; Reedijk, Jan (2013). «Terminology of metal-organic frameworks and coordination polymers (IUPAC Recommendations 2013).