

Síntese, Caracterização e Estrutura Cristalina de um novo polímero de coordenação $\{[Co(dca)_2(4\text{-piridinol})_2]\}_n \cdot 2H_2O$

Brendo M. Gonçalves (IC)¹, Guilherme P. Guedes (PQ)², Livia B. L. Escobar (PQ)^{1*}

¹Departamento de Química, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rua Marquês de São Vicente, 225 Gávea, 22451-900, Rio de Janeiro-RJ, Brasil.

²Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Campus Valonguinho, Outeiro de São João Batista s/n, 24020-007, Niterói-RJ, Brasil.

*liviabescobar@puc-rio.br

Palavras Chave: Compostos de coordenação, dicianamida, química supramolecular

Introdução

Compostos de coordenação apresentam potencial para uma infinidade de aplicações, desde propriedades de adsorção de gases, troca iônica, magnetismo até luminescência¹. Assim, diversas classes de ligantes podem ser exploradas para direcionar topologias de redes adequadas para a formação de arranjos supramoleculares específicos, que irão propiciar e/ou favorecer propriedades interessantes. Neste contexto, ligantes N-doadores e bidentados como o ânion dicianamina (dca^-) são frequentemente escolhidos, pois podem facilitar por exemplo a transmissão das propriedades magnéticas¹. Ligantes auxiliares com diferentes pontos de coordenação como o 4-piridinol (4-Hidroxipiridina) é interessante para a obtenção de redes estendidas, como os polímeros de coordenação².

Neste trabalho foi sintetizado um novo polímero de coordenação contendo o íon $Co(II)$ e os ligantes dca^- e 4-piridinol, que foi caracterizado por espectroscopia vibracional na região do infravermelho e teve sua estrutura determinada por difração de raios X por monocristal.

Resultados e Discussão

O composto foi sintetizado por difusão lenta e o esquema de síntese é representado na figura 1.

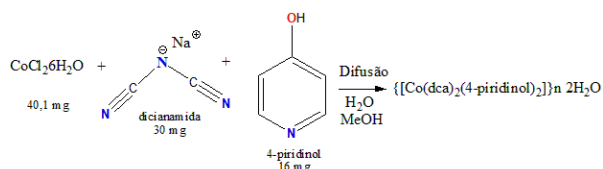


Figura 1. Reação global da formação do complexo.

Após alguns dias houve formação de cristais de coloração rosa, que foram filtrados e analisados por espectroscopia vibracional na região do infravermelho e difração de raios X por monocristal. A comparação dos espectros vibracionais na região do infravermelho do composto com os dos ligantes livres possibilita um indício sobre a formação do composto de coordenação. No caso do ligante dicianamida (dca^-), as bandas referentes aos modos de estiramento assimétrico e simétrico $C \equiv N$ deste

ligante aparecem nas regiões de 2258 a 2227 cm^{-1} e 2214 a 2158 cm^{-1} respectivamente e são de forte intensidade. Nota-se que no complexo, estas bandas foram deslocadas para maiores números de onda quando comparadas com as do ligante livre [$\nu_{as} + \nu_s (C \equiv N)$: 2286 cm^{-1} , $\nu_{as}(C \equiv N)$: 2232 cm^{-1} e $\nu_s(C \equiv N)$: 2179 cm^{-1}] indicando que o ligante dca^- está coordenado de modo bidentado em ponte $\mu_{1,5}$ ao sítio de $Co(II)$ ¹.

Os dados de difração de raios X por monocristal revelam que íon $Co(II)$ apresenta uma geometria de coordenação octaédrica distorcida, coordenado a quatro átomos de nitrogênio dos ligantes dca^- no plano equatorial e a dois átomos de oxigênio do ligante 4-piridinol nas posições axiais. Na tabela 1 são mostrados os principais dados cristalográficos.

Tabela 1. Dados resumidos de difração de raios X por monocristal.

Composto	$\{[Co(Dca)_2(Piridinol)]\}_n \cdot 2H_2O$
Sistema cristalino	Ortorrômbico
Grupo espacial	Pbcn
Parâmetros de rede	a = 14.7473(4) Å b = 7.3668(2) Å c = 32.1174(8) Å $\beta = 90^\circ$
Fórmula molecular	$C_{16}H_{14}CoN_6O_4$
Peso molecular	413.26 g/mol

Conclusões

Foi sintetizado e caracterizado um novo polímero de coordenação 2D, $\{[Co(Dca)_2(Piridinol)]\}_n \cdot 2H_2O$. Este composto teve sua estrutura confirmada por difração de raios X por monocristal.

Agradecimentos

CNPq, FAPERJ e PUC-Rio.

¹Livia B. L. Escobar *et. al*, *Inorg. Chim. Acta*, 451, **2016**, 59–64.

²Ying-Bing Lu *et. al*, *Cryst. Growth Des.* **2022**, 22, 1045-1053.