

Estrutura Cristalina de um complexo de Co(II) com o ácido 2,3-pirazinodicarboxílico

Márcia C. de Souza^a, Renata Diniz^a.

^aNúcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular, Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora – MG, Brasil.

Nos últimos anos a Química Supramolecular tem se tornado uma área de pesquisa cada vez mais investigada, atingindo e consolidando o desenvolvimento da interface entre química, física e biologia.¹

Esta nova área de estudos procura entender as forças intermoleculares responsáveis pela estabilidade de compostos no estado sólido, ou seja, as forças que governam o empacotamento cristalino. Neste campo, estudos de determinação de estrutura cristalina desses complexos são de extrema importância, pois a partir desta é possível não só identificar ligações químicas entre átomos como também estudar as forças que estabilizam o composto no estado sólido.

Nesse trabalho reportamos a estrutura cristalina do complexo polimérico de Co(II) com o ácido 2,3-pirazinodicarboxílico (PDC) denominado CoPDC.

Utilizou-se a síntese hidrotérmica para obtenção do composto CoPDC. Foi misturado uma solução de $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ à uma solução do ácido 2,3-pirazinodicarboxílico, na proporção de 2:1 em etanol e água (1:1). A rampa de aquecimento usada teve início em 25°C. A temperatura foi aumentada até 160°C durante 3 horas e mantida constante por 24 horas. O retorno à temperatura de 25°C foi feita em 40 horas. Após a retirada da solução do complexo CoPDC, observou-se a formação de alguns cristais alaranjados, apropriados à análise por difração de raios X.

Esta análise foi realizada em um difratômetro Oxford GEMINI A- Ultra com detector CCD utilizando radiação $\text{K}\alpha\text{Mo}$ ($\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$) em temperatura ambiente. O refinamento da estrutura foi feito utilizando-se os programas XPREP, XS e XL.²

O composto cristalizou-se no sistema monoclinico e grupo espacial $\text{P}2_1/\text{c}$, cuja célula unitária é, $a = 5,247(1) \text{ \AA}$, $b = 11,113(2) \text{ \AA}$, $c = 10,290(2) \text{ \AA}$, $\beta = 99,507(2)^\circ$ e volume igual a $591,70(2) \text{ \AA}^3$.

O refinamento final de 105 parâmetros utilizando 1365 reflexões independentes [$F_o > 4\sigma(F_o)$] apresentou $R=0,023$, $wR=0,078$ e $S=0,699$. A figura 1 mostra a estrutura cristalina do CoPDC.

Através desta estrutura cristalina obtida, pode-se observar que ocorreu a descarboxilação do ácido 2,3-pirazinodicarboxílico. Este fato se justifica pela alta temperatura em que foi submetido durante a síntese hidrotérmica. Os resultados obtidos comprovam a formação do complexo de coordenação CoPDC. O átomo de Co apresenta geometria octaédrica e está coordenado a dois átomos de oxigênio e dois de nitrogênio do PDC e a duas moléculas de H_2O dando origem a um dímero. As moléculas do dímero formam ligações de hidrogênio moderadas com as moléculas de água gerando um arranjo 3D. As distâncias $\text{O}\cdots\text{O}$ são de $2.784(2)$ e $2.795(2) \text{ \AA}$.

[1] J.-M. Lehn, *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*, VHC, Weinheim, **1995**.

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

Agradecimentos: FAPEMIG, FADEPE, UFJF e LabCri-UFMG.

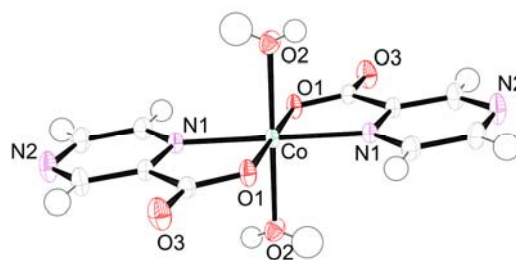


Figura 1: Estrutura cristalina do composto CoPDC.