

Estrutura cristalina do 2,5-dicarboxitereftalato de 4-carboxibenzenoamônio

G. C. dos Santos^a, N. G. Fernandes^a

^aDepartamento de Química, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil.

O ácido 4-aminobenzóico, C₇H₇NO₂, o ácido piromelítico, C₁₀H₆O₈, e seus derivados têm sido amplamente estudados em áreas da química e da biologia. Uma das características que chama a atenção em análises cristalográficas desses compostos são as ligações de hidrogênio presentes em suas estruturas. Nos últimos anos, inúmeros avanços, vinculados à existência desse tipo de interação têm sido alcançados em diversas áreas da ciência com destaque para química de compostos supramoleculares^[1]. Esse trabalho reporta a caracterização estrutural do sal descrito no título resultante da reação desses dois ácidos. Os cristais foram obtidos a temperatura ambiente após a evaporação lenta de uma mistura de soluções aquosas do ácido piromelítico com o ácido 4-aminobenzóico na razão molar 1:2. Os dados cristalográficos foram obtidos à 293K num difratômetro Gemini ultra do Laboratório de Cristalografia da UFMG, com radiação MoK α . A estrutura cristalina do composto foi resolvida através dos métodos diretos (SHELXS-97)^[3] e refinada utilizando o método dos mínimos quadrados (SHELXL-97)^[3].

Dois prótons originários do ácido piromelítico são transferidos para duas moléculas do ácido 4-aminobenzóico. A estrutura cristalina é centrossimétrica e apresentam cinco diferentes ligações de hidrogênio. Há dois tipos de ligações de hidrogênio, N–H---O e O–H---O, ambos são fortes, com distâncias D---A que variam entre 2,61 e 2,89 Å. As ligações de hidrogênio O---O são aproximadamente paralelas ao eixo cristalográfico b e uma das ligações de hidrogênio N---O é paralela ao eixo c. Desta forma, a disposição dos íons e a rede tridimensional de ligações de hidrogênio formam um arranjo supramolecular.

Tabela 1. Dados cristalográficos do composto.

| Formula molecular | (C ₇ H ₈ NO ₂) ₂ (C ₁₀ H ₄ O ₈) |
|--------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Massa Molar | 528,43 g/mol |
| Sistema Cristalino | Triclínico |
| Grupo Espacial | P-1 |
| a | 6,6314(2) Å |
| b | 9,5284(3) Å |
| c | 9,8203(3) Å |
| α | 66,511(3)° |
| β | 87,534(2)° |
| γ | 83,336(2)° |
| Z | 1 |
| R | 0,0466 |
| S | 1,058 |
| wR | 0,1413 |

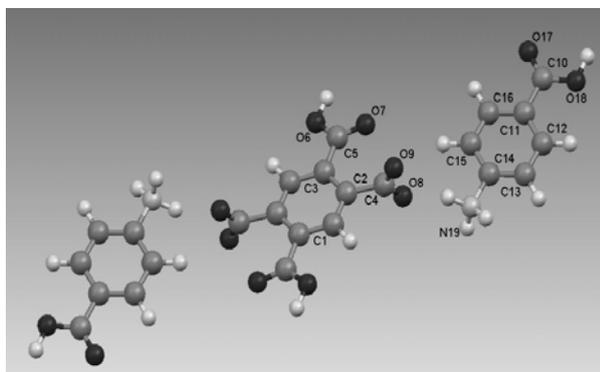


Figura 1. Representação Mercury 2.2^[5] para o composto. A unidade assimétrica é definida pelos átomos rotulados.

Referências

- [1] JONES, W., Organic molecular solids: properties and applications, Ed. CRC press pag 149- 199, United Kingdom (1997).
 [2] Sheldrick, G.M., SHELXL-97 and SHELXS-97: Program for Crystal Structure Analysis. Univ. of Göttingen, Göttingen, Germany(1997).
 [3] Farrugia, L.J., J.Appl.Cryst., Vol 30, Pag 565(1997).
 [4] Diniz, R., Ligações de hidrogênio em cristais: sais do ácido piromelítico, tese de doutorado, UFMG(2003).
 [5] C. F. Macrae, I. J. Bruno, J. A. Chisholm, P. R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, L. Rodriguez-Monge, R. Taylor, J. van de Streek and P. A. Wood, Mercury CSD 2.0 - new features for the visualization and investigation of crystal structures, J. Appl. Cryst., 41, 466-470, 2008.

Agradecimentos

FAPEMIG, FINEP e UFMG.