

## Caracterização por Difração de Raios X do complexo de Cu(II) com o ligante nitrogenado 4,4'-dimetil – 2,2' bipyridina

W.R. do Carmo<sup>a</sup>, D.M. de Faria<sup>a</sup>, F.C. Machado<sup>a</sup> e R.Diniz<sup>a</sup>.

<sup>a</sup>Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Brasil.

Nos últimos anos a Química Inorgânica Supramolecular tem sido uma área frequentemente investigada devido às novas topologias estruturais obtidas e a potencial aplicação de novos compostos em catálise, óptica e magnetismo.<sup>1</sup>

Sendo importante o controle de formação de polímeros de duas e três dimensões tem-se utilizado a aproximação de blocos construtores para a construção da estrutura desejada. A cristalografia é a ciência que estuda a teoria e as técnicas pelas quais os arranjos atômicos no estado sólido podem ser estabelecidos. As técnicas mais utilizadas na identificação desses arranjos são as difrações de raios X e a de nêutrons.

Nesse trabalho reportamos a estrutura cristalina do complexo de Cu(II) contendo o ligante 4,4'-dimetil-2,2'-bipyridina (Mebpy), denominado (CUMEOX).

O composto CUMEOX foi sintetizado a partir a reação de CuCl<sub>2</sub>, Mebpy, Na<sub>2</sub>C<sub>2</sub>O<sub>4</sub> na proporção de 1:1:1/2.<sup>2</sup>

O CUMEOX foi obtido na segunda filtração, onde alguns cristais de cor azul foram formados. Esta análise foi realizada no equipamento BRUKER, KAPPA CCD à temperatura ambiente e radiação de K $\alpha$  Mo (0,71073Å). O refinamento da estrutura foi feito utilizando-se os programas XPREP, XS e XL.<sup>3</sup>

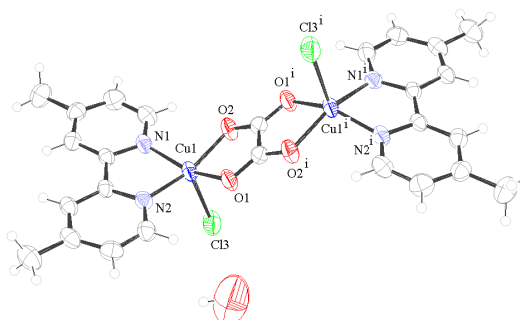


Figura 1: Estrutura cristalina do cumeox.

Simetria: (1/2-x, 1,5-y, 2-z).

O composto cristalizou-se no sistema monoclinico e grupo espacial C2/c, cuja célula unitária é, a = 17,840(3) Å, b = 17,737(3) Å, c = 13,588(2) Å,  $\alpha = 90,00^\circ$ ,  $\beta = 130,549(8)^\circ$ ,  $\gamma = 90,00^\circ$  e volume igual a 3267,2(9) Å<sup>3</sup>. O refinamento final de 181 parâmetros utilizando 2649 reflexões [ $F_0 > 2\sigma(F_0)$ ] apresentou R = 0,0616 e S = 1,111. A figura 1, mostra a estrutura cristalina do CUMEOX.

Os resultados obtidos comprovam a formação do dímero CUMEOX. O átomo de Cu apresenta geometria pirâmide de base quadrada, sendo a sua base formada por dois átomos nitrogênio e dois átomos de oxigênio de ligantes distintos. Percebe-se através da análise dos dados da difração de raios x que o centro de inversão encontra-se no meio dos dois átomos de carbono do oxalato.

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

[2] D.M. de Faria, et all, Polyhedron, **2007**, 26, 4525 – 4532.

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

Agradecimentos: FAPEMIG, UFJF, LDR-X UFF.