

Obtenção de redes metalorgânicas contendo um ligante derivado do 2,2'-diamino-4,4'-bitiazol

Samanta Araújo de Matos
Danielle Cangussu
Lucas Hoffmann Greghi Kalinke

PIVIC
CÂMPUS ANÁPOLIS
LUCAS.KALINKE@IFG.EDU.BR

Palavras-chave: MOFs; Oxamato; Química de Coordenação.

Introdução

As MOFs, ou Estruturas Metalorgânicas, são materiais porosos que surgem da coordenação entre íons metálicos e ligantes orgânicos. (WANG. et al. 2013).

Os ligantes oxamato são extensivamente estudados na síntese de polímeros de coordenação, especialmente na criação de compostos de coordenação supramoleculares bimetálicos. Os ligantes oxamatos são derivados do ácido oxâmico que a partir da funcionalização do átomo de nitrogênio, resultando em diversas estruturas e modos de coordenação. Esses ligantes são categorizados como mono, bis ou trisoxamatos, conforme os grupos oxamato ligados. (DUL et al., 2010). Baseando-se na estrutura e potencialidade do composto $K_6Co_3L_3 \cdot 11H_2O \cdot MeOH$ [L= *N,N'*-2,2'-(4,4'-bitiazol)-bis(oxamato)]. (KALINKE et al. 2022) o trabalho tem como objetivo a obtenção de redes metalorgânicas heterometálicas com poros funcionalizados com enxofre, usando o composto análogo de $Na_6Ni_3L_3$ como base.

Metodologia

A obtenção das redes metalorgânicas se deu por meio de difusão lenta em tubo H. Utilizando o complexo precursor $Na_6Ni_3L_3$ e o sais dos íons metálicos, Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Ni^{2+} , Mn^{2+} , Y^{3+} , Bi^{3+} , Sm^{3+} , Eu^{3+} , La^{3+} , Ho^{3+} . O tubo foi fechado e deixado em repouso por no mínimo 20 dias. Após esse período foram caracterizados por espectroscopia no infravermelho e difração de raios X apenas os sólidos obtidos na forma de monocristais.

Resultados e Discussão

Após a difusão lenta do tubo em H, com o complexo precursor $[Ni_3L_3]^{6-}$, houve a formação de monocristais com os íons Ca^{2+} , Sr^{2+} e Ba^{2+} . Com a caracterização dos cristais por infravermelho pode-se observar bandas largas que indicam o estiramento da ligação (O-H) indicando a presença de água, o estiramento da ligação (C=O), indicando a presença do grupo oxamato, o estiramento da ligação (C-S), indicando a presença do anel aromático do tiazol e o estiramento da ligação (C=N), indicando a presença do grupo

funcional do oxamato. Os monocristais dos compostos $Ca_3Ni_3L_3$, $Sr_3Ni_3L_3$ e $Ba_3Ni_3L_3$ foram analisados por difração de raios X de monocristal e aqui estão apresentados os resultados preliminares de refinamento da estrutura cristalina.

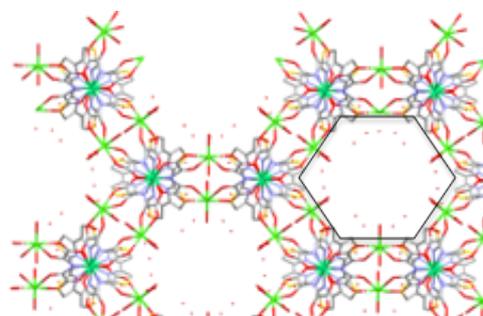


Figura 1. Visualização dos poros hexagonais formados no plano metalorgânico do composto $Ca_3Ni_3L_3$.

O íon Ca^{2+} levou à formação de uma estrutura porosa (Figura 1), enquanto o íon Sr^{2+} resultou em estruturas com cavidades que foram preenchidas totalmente por moléculas de água e íon Ba^{2+} resultou em estruturas densas e com ausência de cavidades.

Conclusões

Três redes metalorgânicas foram obtidas utilizando o complexo precursor $[Ni_3L_3]^{6-}$ com íons Ca^{2+} , Sr^{2+} e Ba^{2+} . A análise das estruturas revelou que íons maiores resultam em redes mais compactas, enquanto a única rede porosa foi obtida com o íon Ca^{2+} , que possui o menor raio iônico dentre os estudados.

Referências Bibliográficas

DUL, M.-C. et al. **Coordination Chemistry Reviews**, v. 254, n. 19–20, p. 2281–2296, 2010.

WANG, P. et al. **CrystEngComm**, v. 15, n. 22, p. 4489, 2013.

Kalinke, Lucas H. G. et al. **Inorganic Chemistry**, v.61, n.15, p. 5696-5700. 2022.