Síntese e Caracterização Estrutural de Composto de Coordenação de Zinco(II) com Ligante Triazólico.

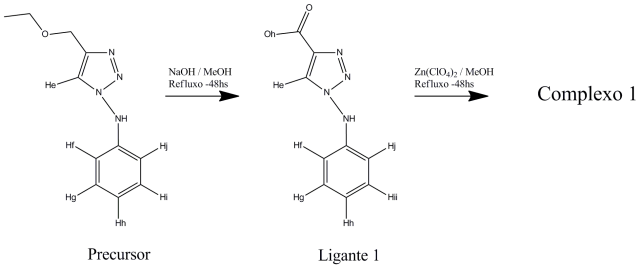
Olívia Brito de O. Moreira*[1](IC), Maria Clara R. Freitas[1](PG), Alessandro K. Jordão[1](PG), Anna C. Cunha[1](PQ), Vitor F. Ferreira[1](PQ), Jackson A. L. C. Resende[1](PQ).

1.Universidade Federal Fluminense - UFF, IQ, Instituto de Química.
*Oliviabritomoreira@id.uff.br
Palavras Chave:*Triazol, complexo de zinco, Difração de raios X*

Introdução

O triazol pertence a uma classe de compostos heterocíclicos nitrogenados sintéticos de cinco membros denominados azol. O 1,2,3 triazol destaca-se pelo vasto campo de aplicações, que vão desde usos como explosivos, agroquímicos e sobretudo farmacológico, devido sua atividade antifúngica, antiviral e anticancerígena. O grupo comporta-se ainda como excelente ligante para metais[1]. Com base nessas características propõe-se a construção de um complexo de zinco com o ligante 5-metil-1-fenilamina-1H-1,2,3-triazol(**1**)[2]

Resultados e Discussão



Esquema 1: Metodologia de síntese do polímero de coordenação.

A análise espectroscópica do ligante 1 permite constatar a formação do produto da hidrólise, devido a ausência da banda por volta de 1720cm^{-1}. Observa-se também o aumento do ponto de fusão, passando de 163ºC para 256ºC.

Como resultado da segunda etapa da reação (formação do composto de coordenação), obteve-se uma solução límpida de coloração amarela, que foi deixada em repouso por 5 dias até a formação do cristal. A análise por difração de raios X apresenta de íons de Zn(II) e Na(I) ambos apresentando geometria octaédrica (Figura 1). O íon Zn(II) apresenta coordenação do tipo N_2O_4 sendo 2 nitrogênios triazólicos e 3 oxigênios carboxilatos e um oxigênio de água. Enquanto o íon Na(I) apresenta apenas 6 átomos de oxigênio proveniente do carboxilato na sua esfera de coordenação. Uma vez que os ligantes coordenam-se em ponte entre os íons metálicos, observa-se um polímero de coordenação catiônico bidimensional, que se estende ao longo do plano ***ab***. (Figura 2).

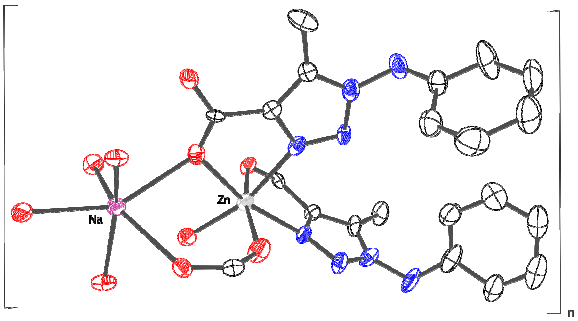


Figura 1. Representação da estrutura do polímero formado pelo ligante **1** com Zn(II) e Na(I) e da unidade química fundamental.
Dados cristalográficos do complexo **1** $[\{Na_2[Zn(C_{10}H_9N_4O_2)_2]_{12}\}\cdot(ClO_4)_2]_n$, monoclínico, Cc, a= 25,682(3), b=14,804(2), c=43,223(5), β=95,74(3), R=8,37%,26301/1946.

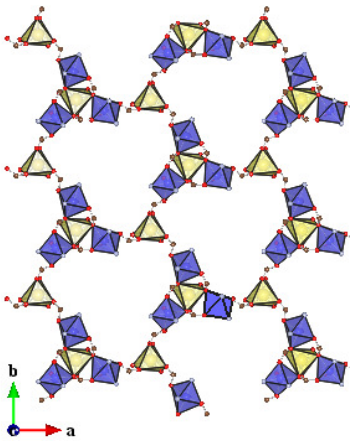


Figura 2. Representação da rede bidimensional do polímero de coordenação.

Conclusões

Os resultados demonstram que a hidrólise e a reação de coordenação foram realizadas com sucesso. O refinamento possibilitou a constatação da formação de um polímero de coordenação bidimensional contendo centros metálicos Zn(II) e Na(I).

Agradecimentos

UFF, CNPq, CAPES, FAPERJ

[1]Melo, J. O. F. et al.. **Química Nova,** v. 29, p. 569-579, 2006.
[2]Jordão, Alessandro K.et. al.. **CrystEngComm**,14,6534–6539, 2012.