



Síntese e Caracterização de um Polímero de Coordenação Bidimensional de Cu (II) por Difração de Raios X por Monocristal

Isabelle de S. Leroy^{1*} (G), Victoria F. M. Calisto¹ (PG), Renata Diniz¹ (PQ)

¹Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Química, ICEx, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil, 31270901

*email: isabellesleroy@gmail.com

RESUMO

Polímeros de coordenação (PCs) são compostos formados pela repetição de entidades de coordenação em uma, duas ou três dimensões. Devido à sua estrutura estável, apresentam aplicações em catálise, adsorção e luminescência. Um polímero de coordenação bidimensional de Cu(II) foi sintetizado com fluconazol e ácido 4-sulfobenzóico. Sua caracterização foi realizada por difração de raios X por monocristal (SCXRD), que revelou sua cristalização no grupo espacial Cc.

Palavras-chave: polímeros de coordenação, fluconazol, ácido 4-sulfobenzóico

Introdução

Polímeros de coordenação (PCs) constituem uma classe de materiais amplamente estudada devido à sua estrutura modular e às diversas aplicações tecnológicas que oferecem. De acordo com a IUPAC, esses compostos são formados pela repetição de entidades de coordenação em uma, duas ou três dimensões, com átomos centrais coordenados a ligantes orgânicos ou inorgânicos [1]. Sua arquitetura estável permite o desenvolvimento de materiais com propriedades específicas, como catálise [2], adsorção [3] e luminescência [4]. O uso do fluconazol como ligante destaca-se por conferir propriedades luminescentes ao material, devido à presença de grupos funcionais capazes de estabelecer interações supramoleculares, como interações π - π e ligações de hidrogênio [5]. Neste trabalho, é apresentado um polímero de coordenação bidimensional de Cu(II), obtido com fluconazol e ácido 4-sulfobenzóico. A caracterização estrutural do composto foi realizada por difração de raios X por monocristal (SCXRD), revelando sua cristalização no grupo espacial Cc.

Experimental

Síntese do polímero bidimensional.

A síntese foi feita na proporção 1:1:1 (fluconazol, nitrato de cobre (II) tri-hidratado e ácido 4-sulfobenzóico respectivamente), utilizando 0,5 mmol como base. Foram pesados em um béquer 0,1202 g de ácido 4-sulfobenzóico, que foi solubilizado com 5 mL

de água destilada. Em seguida, o ácido foi neutralizado com 0,0538 g de carbonato de sódio. O pH medido foi 7. Após isso, foram medidos 0,1534 g de fluconazol, que foram adicionados no mesmo béquer contendo o ácido. Para solubilizar o fluconazol, foram adicionados 15 mL de etanol. Após isso, em outro béquer, foram pesados 0,1212 g de nitrato de cobre(II) tri-hidratado, que em seguida foram solubilizados com 20 mL de etanol. A solução contendo o cobre foi adicionada gota a gota sobre a solução contendo os ligantes, formando um precipitado de cor azul em forma de pó. Essa solução contendo o precipitado foi levada ao ultrassom por 12 minutos e em seguida foi submetida a aquecimento com agitação por aproximadamente 10 minutos. Logo depois, a solução foi filtrada e transferida para outro béquer, que foi tampado com plástico filme, e furado para ser possível a cristalização por meio da evaporação lenta.

Resultados e Discussão

Após cerca de 34 dias, o cristal formado foi levado ao aparelho de difração de raios X para caracterização estrutural. Com isso, foi determinado que o composto é um polímero bidimensional que se cristalizou no sistema monoclinico e no grupo espacial Cc. A estrutura foi refinada utilizando os programas CrysAlisPro (RIGAKU, 2014), Olex2 (DOLOMANOV et al., 2019) e SHELX (SHELDRICK, 2015). Durante o refinamento, foram identificadas quatro moléculas de água na rede cristalina, porém, não foi possível identificar a posição de três delas, pois estavam desordenadas. Nas figuras de 1 a 3, estão a unidade assimétrica (figura 1) e extensão da estrutura ao longo do plano *ac* (figura 2), assim como sua estrutura simplificada (figura 3).



Além disso, foi observado que a proporção de ácido, fluconazol e metal é de, respectivamente, 1:2:1, e tem-se que o íon cobre tem número de coordenação 5, pois está coordenado a 4 átomos de nitrogênio do fluconazol e a um átomo de oxigênio do ácido 4-sulfobenzóico, e tem como geometria pirâmide de base quadrada.

Como o tratamento dos dados estruturais foi concluído, tem-se em perspectiva a busca por aplicações, uma vez que polímeros de coordenação possuem diversas propriedades de catálise, adsorção, e até mesmo luminescência, pois o fluconazol possui essa característica que pode ser estendida para o polímero. Além disso, por ser um polímero bidimensional, possui maior área de superfície e também pode formar canais que favorecem a adsorção e até canais de rede de hidrogênio, que estabilizam a rede polimérica e podem servir como transporte de carga.

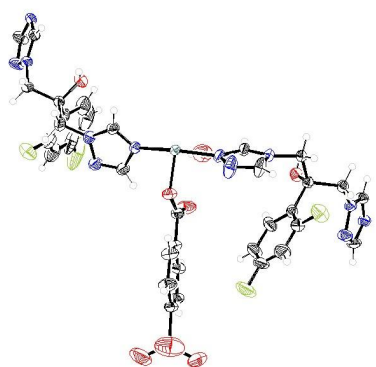


Figura 1. Unidade assimétrica.

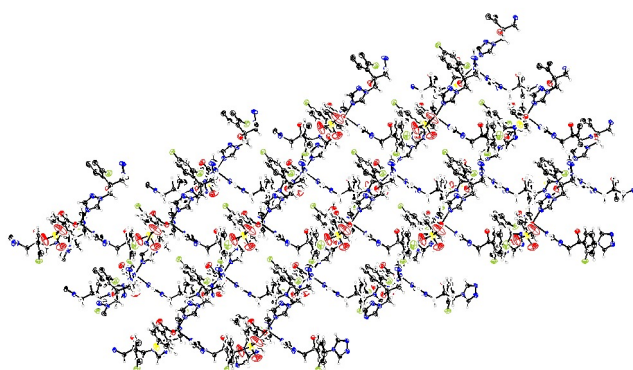


Figura 2. Extensão ao longo do plano ac.

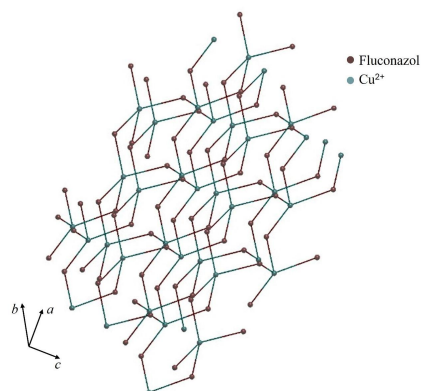


Figura 3. Estrutura simplificada.

Conclusões

O polímero de coordenação bidimensional de Cu(II) sintetizado e caracterizado neste trabalho apresenta estrutura cristalina definida e potencial para aplicações em catálise, adsorção e luminescência. Sua arquitetura em camadas, aliada à presença de fluconazol como ligante, favorece a formação de canais e redes de hidrogênio, que podem atuar no transporte de carga e na estabilização da estrutura, ampliando suas possibilidades de uso em sistemas funcionais avançados.

Agradecimentos



Referências

1. S. R Batten *et al.* Pure and Applied Chemistry, **85**, 1715 – 1724 (2013).
2. FAN, F. *et al.*, ACS applied materials & interfaces, **15**, n. 30, p. 37086–37092, 20 jul. 2023.
3. BARUAH, J. B., Coordination Chemistry Reviews, **470**, p. 214694–214694, 1 nov. 2022.
4. ZHANG, L. *et al.*, Inorganica chimica acta/Inorganica Chimica Acta, **363**, n. 5, p. 866–876, 1 mar. 2010.
5. HELA FERJANI *et al.*, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, **237**, p. 118354–118354, 1 ago. 2020.