

Síntese, Análise Estrutural e Topológica de Polímeros de Coordenação

Mariana da Silva Cunha (IC), Filipe Barra de Almeida (colaborador), Renata Diniz (Orientadora)

Introdução e Objetivo

O aumento nas pesquisas relacionadas aos polímeros de coordenação tem desempenhado papel importante na amplificação de parâmetros para controle estrutural e funcional dos sólidos cristalinos. Os polímeros de coordenação são estruturas baseadas na ligação entre um íon metálico e um ligante orgânico, que se estendem infinitamente, formando uma macro-estrutura¹.

O interesse em se estudar essas estruturas se deve às suas propriedades, que podem ser relacionadas a várias aplicações, tais como a capacidade de formar poros, que possibilitam a utilização dos mesmos em catálise, transporte de fármacos e estocagem de gases².

O objetivo deste trabalho foi sintetizar um polímero de coordenação com o metal Zn^{2+} .

Resultados e Discussões

A síntese denominada P112 foi feita pela adição de uma solução contendo Isoniazida e $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ em uma solução contendo Ácido 1,3,5-benzenotricarboxílico e NaOH, ambos solubilizados em DMF e água, na qual foram obtidos cristais incolores. A caracterização foi feita via espectroscopia vibracional, análise elementar e difração de raios X por monocristais.

Pela espectroscopia vibracional pode-se comprovar a presença de bandas correspondentes aos modos vibracionais característicos da Isoniazida e do Ácido 1,3,5-BTC, confirmando a presença dos ligantes na estrutura do polímero formado. A análise elementar sugeriu a fórmula mínima para o composto como $C_{15}H_{20}N_3O_{12}Zn_{1,5}$.

A difração de raios X por monocristal permitiu a obtenção das posições de cada átomo no cristal bem como a interação entre eles. O polímero obtido possui sistema cristalino triclinico com grupo espacial P-1 e sua estrutura apresentou uma formação de poros ao longo da diagonal do plano cristalográfico ab e as ligações de coordenação estenderam-no de forma unidimensional na direção da diagonal desse plano.

Conclusões

Foi possível obter um polímero de coordenação com os ligantes Isoniazida e Ácido 1,3,5-BTC. Pode-se concluir que as técnicas utilizadas para estudo da estrutura do polímero

foram satisfatórias na determinação da fase cristalina e permitiram a caracterização do composto sintetizado.

Referências Bibliográficas

1 - J. W. Steed and J. L. Atwood, Supramolecular Chemistry, 2th ed., West Sussex, 2009

2 - M. Eddaoudi, J. Kim, N. Rosi, D. Vodak, J. Wachter, M. O'Keeffe and O. M. Yaghi, Science, 2002, 295, 469-472