

Simpósio de Integração Acadêmica

“Ciências Básicas para o Desenvolvimento Sustentável”

SIA UFV 2023

UFV
Universidade Federal
de Viçosa

Síntese de complexos de coordenação baseados em ligantes imidazólicos como precursores para aplicação em baterias

Nathany Lopes de Oliveira Sousa, Garbas Anacleto dos Santos Junior, Angel Amado Recio Despaigne
Síntese, complexos metálicos, imidazol, Química inorgânica

Introdução

Atendendo a demanda atual sobre a procura de materiais para armazenamento de energia de alto desempenho, o presente trabalho propõe o desenvolvimento de mecanismos de reações para as sínteses de complexos imidazólicos de metais de transição os quais serão usados como precursores nas sínteses hidrotermal de Olivinas do tipo LiMPO_4 (com $M = \text{Fe, Co ou Ni}$) procurando aumentar a estabilidade e condutividade eletrônica e, portanto, o desempenho delas. Foi realizado a síntese dos complexos de coordenação usando sais dos metais de Fe, Co e Ni procurando que os complexos formados estabilizem o metal no seu estado de oxidação $2+$ em ambiente oxidante e além disso, a decomposição do ligante, nas condições de síntese pode ser uma fonte de carbono, o que aumentaria a condutividade do material e então seu desempenho eletroquímico.

Objetivos

Sintetizar e caracterizar os complexos formados através das técnicas de CHNS e infravermelho, de modo a se conhecer sua estrutura molecular

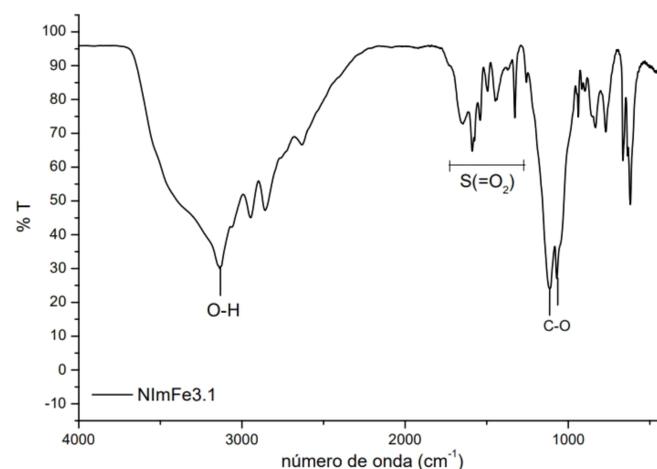
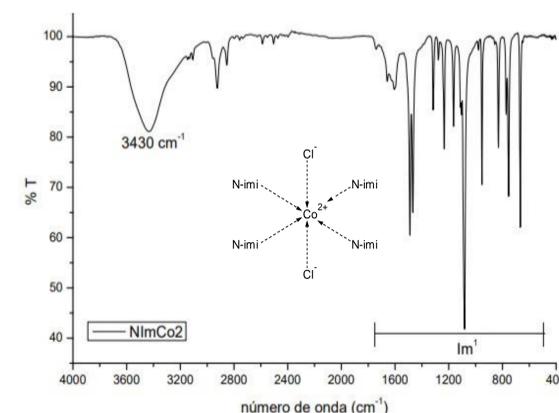
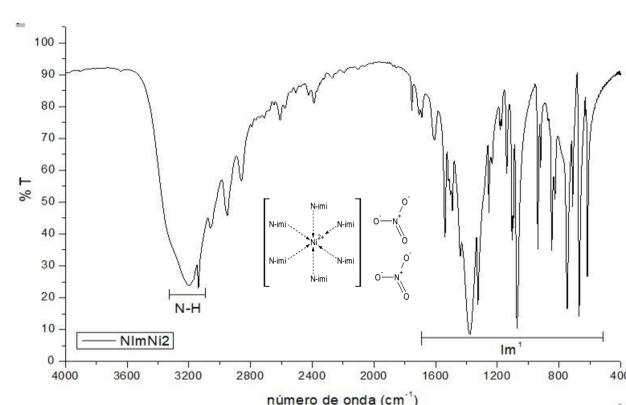
Material e Método

Foram sintetizados complexos utilizando Cloreto de cobalto(II) hexahidratado, Nitrato de níquel(II) hexahidratado e Sulfato de ferro(II) heptahidratado, com o ligante Imidazol¹ em solvente aquoso e glicerol², no caso do Fe, numa proporção de 1:6, metal-ligante, aquecida em refluxo e filtrada a vácuo.

Resultados e Discussão

Os complexos obtidos foram caracterizados por análise elementar e encontrado os seguintes resultados: Para o complexo de Ni: Teórico%: C = 36.60; H = 4.09; N = 33.20; Prático%: C = 36.50; H = 4.01; N = 32.80; Para o complexo de Co: Teórico%: C = 35.80; H = 4.01; N = 27.9; Prático%: C = 35.20; H = 2.98; N = 27.1; Para o complexo de Fe: Teórico%: C = 25.97; H = 4.84; N = 13.46; Prático%: C = 25.60; H = 3.99; N = 14.11;

Sugerindo as seguintes formulas moleculares: $[\text{Fe}(\text{Gly})^2(\text{Im})_2(\text{SO}_4)] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{CoCl}_2(\text{Im})_4]$ e $[\text{Ni}(\text{Im})_6] \cdot 2(\text{NO}_3)$, obtendo no composto de Ni e Co a presença de monocristais. A partir da análise de espectroscopia (IV) nota-se a presença de bandas característica da molécula de Im^1 , principalmente para o complexo de Ni e Co, os quais se mostraram coordenados com mais moléculas de Im^1 , cuja ligações de estiramento (C=N) e (C-N) estão representados nos intervalos (1800 - 1577) cm^{-1} , (1543 - 1261) cm^{-1} e (1261 - 1324) cm^{-1} . Uma banda larga (1557 e 1374) cm^{-1} são devidas a vibrações de estiramento de ligações C-N do anel Im^1 e do estiramento N-H uma banda em (3202 e 3134) cm^{-1} , no caso do Ni. Pela análise de espectroscopia de infravermelho observou um estiramento da ligação O-H em 3136 cm^{-1} e para C-O em 1115 - 1068 cm^{-1} proveniente da molécula de Gly^2 e bandas de absorção intensas em (1.324 - 1.300) cm^{-1} e em (1.534 - 1.255) cm^{-1} , originadas respectivamente das deformações axiais assimétrica e simétrica das sulfonas $\text{S}(=\text{O}_2)$ para o Fe. O espectro de IV para o Co notou-se um deslocamento na banda em 3430 cm^{-1} correspondente a coordenação do metal com os ligantes e as demais bandas são características das ligações do C=N, C-N, C-H e C-C das moléculas de imidazol presente no complexo.



Conclusões

A partir das caracterizações feitas obteve-se a verificação dos complexos sintetizados e suas respectivas fórmulas moleculares, além da comprovação do número de coordenação (NC=6), para os três complexos e a proposta das estruturas dos complexos. No caso do complexo de Fe, observou-se uma possível formação de isômeros cis e trans. O ligante glicerol e o sulfato se coordenaram bidentados, sendo, portanto, todos octaédricos.

Bibliografia

Fudulu, A.; Olar, R.; Maxim, C.; Scăețeanu, G.V.; Bleotu, C.; Matei, L.; Chifiriuc, M.C.; Badea, M. New Cobalt (II) Complexes with Imidazole Derivatives: Antimicrobial Efficiency against Planktonic and Adherent Microbes and In Vitro Cytotoxicity Features. *Molecules* 2021, 26, 55. <https://dx.doi.org/10.3390/molecules26010055>

Agradecimentos

