

ESTUDOS ESPECTROSCÓPICOS E ESTRUTURAIS DOS POLÍMEROS DE COORDENAÇÃO 2D,
[Tb(DPA)(HDPA)] E [Gd(DPA)(HDPA)]

Marcelo O. Rodrigues, Antonio M. Brito-Silva e Severino Alves Júnior*

Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, 50590-470 Recife - PE, Brasil

Carlos A. De Simone

Instituto de Química e Biotecnologia, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970 Maceió - AL, Brasil

Adriano Antunes S. Araújo, Pedro Henrique V. de Carvalho, Sílvia Caroline G. Santos, Kennedy Alexandre S. Aragão,
Ricardo O. Freire e Maria Eliane Mesquita

Departamento de Química, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000 São Cristóvão - SE, Brasil

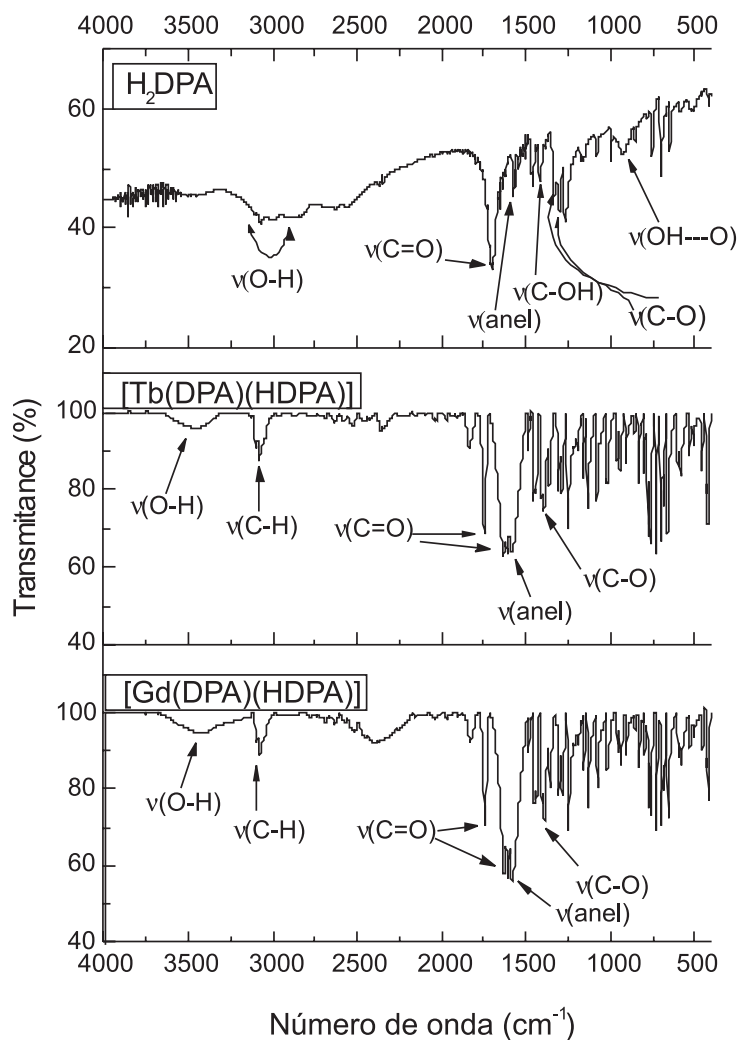


Figura 1S. Espectro de absorção na região do infravermelho do ligante livre e das redes de coordenação [Tb(DPA)(HDPA)] e [Gd(DPA)(HDPA)]

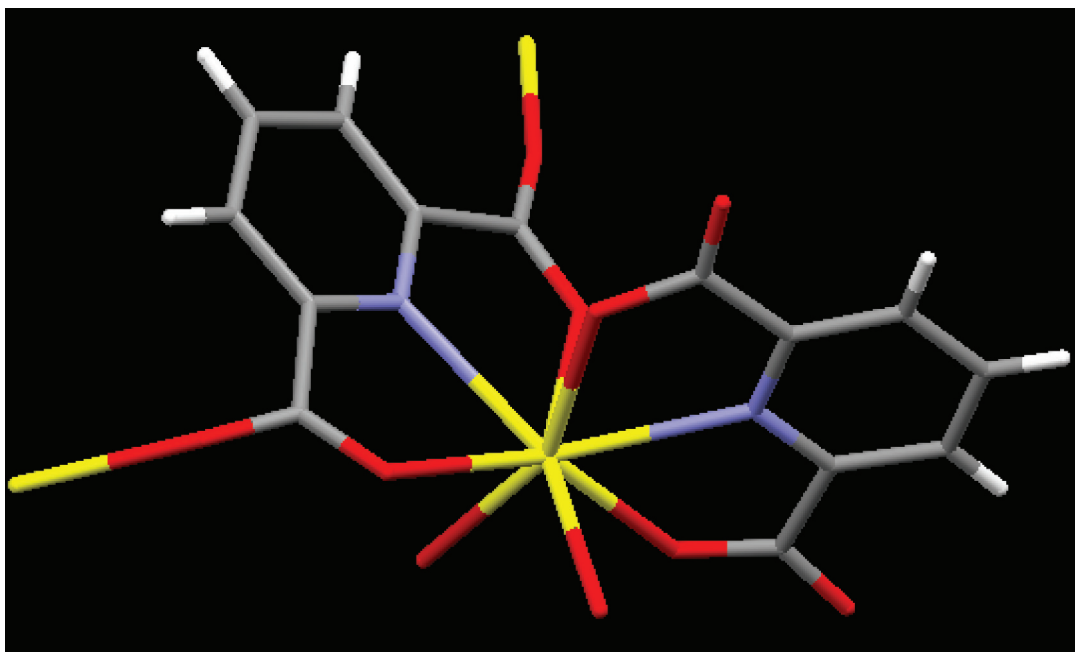


Figura 2S. Unidade assimétrica da rede de coordenação $[\text{Gd}(\text{DPA})(\text{HDPA})]$. Carbono: cinza; Hidrogênio: branco; Nitrogênio: azul; Oxigênio: vermelho; Gadolínio: Amarelo

Tabela 1S. Coordenadas atômicas ($\text{Å}^2 \times 10^3$) e parâmetros de vibração térmica isotrópicos do $[\text{Tb}(\text{DPA})(\text{HDPA})]$

	x	y	z	U(eq)
O(3)	2860(2)	5108(3)	1727(2)	19(1)
C(12)	3619(3)	-1028(4)	-804(2)	17(1)
O(2)	-346(2)	-364(3)	1107(3)	36(1)
C(13)	3415(3)	253(4)	-223(2)	13(1)
C(10)	4337(4)	-2477(4)	727(3)	16(1)
C(9)	4118(2)	-1138(4)	1254(2)	13(1)
C(7)	1967(3)	5884(4)	1627(3)	20(1)
C(11)	4052(4)	-2424(4)	-323(4)	21(1)
C(6)	906(3)	4913(4)	1431(3)	17(1)
C(1)	375(3)	618(4)	1282(3)	20(1)
C(2)	163(4)	2375(4)	1262(4)	19(1)
N(1)	1051(2)	3329(4)	1441(2)	15(1)
C(3)	-925(3)	2946(5)	1075(3)	27(1)
C(5)	-159(3)	5581(5)	1256(3)	24(1)
C(4)	-1086(3)	4578(5)	1079(3)	29(1)
O(5)	3900(2)	62(3)	2776(2)	16(1)
O(6)	5143(2)	-1909(4)	2879(2)	18(1)
O(7)	2689(3)	2771(3)	31(2)	22(1)
O(4)	1901(3)	7348(3)	1705(4)	46(1)
C(8)	4407(2)	-990(4)	2390(2)	12(1)
C(14)	2928(3)	1830(4)	-623(2)	14(1)
Tb	3027(1)	2327(1)	1819(1)	10(1)
N(2)	3640(2)	176(3)	794(2)	12(1)
O(1)	1474(2)	285(3)	1531(2)	21(1)
O(8)	2803(2)	2134(3)	-1547(2)	20(1)

Tabela 2S. Parâmetros de vibração térmica anisotrópicos ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) do polímero de coordenação $[\text{Tb}(\text{DPA})(\text{HDPA})]$

U11	U22	U33	U23	U23	U13	U13
O(3)	21(1)	13(2)	25(10)	2(1)	5(1)	0(1)
C(12)	21(2)	22(2)	8(1)	0(1)	2(1)	1(1)
O(2)	22(2)	20(2)	65(2)	-2(1)	4(1)	-6(1)
C(13)	15(2)	16(2)	10(2)	3(1)	4(1)	-1(1)
C(10)	29(2)	10(2)	14(2)	4(1)	10(2)	5(1)
C(9)	13(1)	15(2)	12(2)	1(1)	4(1)	2(1)
C(7)	28(2)	11(2)	21(2)	2(1)	6(1)	1(2)
C(11)	25(2)	18(2)	20(3)	-5(1)	8(2)	2(1)
C(6)	20(2)	16(2)	16(2)	-1(1)	3(1)	4(2)
C(1)	18(2)	17(2)	24(2)	2(2)	2(1)	1(2)
C(2)	20(2)	14(2)	24(3)	0(1)	5(2)	1(1)
N(1)	16(1)	16(2)	13(1)	1(1)	4(1)	2(1)
C(3)	16(2)	26(2)	38(2)	7(2)	3(2)	0(2)
C(5)	29(2)	15(2)	27(2)	3(2)	6(2)	10(2)
C(4)	19(2)	30(2)	38(2)	7(2)	4(2)	9(2)
O(5)	20(1)	16(1)	10(1)	1(1)	3(1)	5(1)
O(6)	16(1)	23(1)	15(1)	4(1)	2(1)	5(1)
O(7)	35(2)	21(2)	11(2)	1(1)	7(1)	10(1)
O(4)	37(2)	11(2)	88(3)	-2(1)	9(2)	2(1)
C(8)	13(2)	10(2)	12(2)	3(1)	2(1)	-3(1)
C(14)	14(2)	15(2)	12(2)	-1(2)	4(1)	-2(1)
Tb	13(1)	9(1)	8(1)	0(1)	2(1)	0(1)
N(2)	14(1)	14(2)	10(1)	-1(1)	3(1)	1(1)
O(1)	16(1)	12(1)	36(2)	1(1)	5(1)	2(1)
O(8)	30(2)	20(1)	12(2)	3(1)	6(1)	2(1)

Tabela 3S. Coordenadas atômicas ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) e parâmetros de vibração térmica isotrópicos ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) dos átomos de hidrogênio do polímero de coordenação $[\text{Tb}(\text{DPA})(\text{HDPA})]$

	x	y	z	U(eq)
H(12)	3468	-954	-1508	21
H(10)	4665	-3380	1066	20
H(11)	4150	-3318	-702	25
H(3)	-1531	2250	951	33
H(5)	-250	6683	1258	28
H(4)	-1805	5000	964	35
H(1)2	1530	-931	1527	32

Tabela 4S. Distâncias interatômicas (Å) e ângulos (°) referentes à primeira esfera de coordenação do $[Gd(DPA)(HDPA)]$

Gd-O(7) ⁱ	2.290(4)
Gd-O(8) ⁱⁱ	2.334(2)
Gd-O(1)	2.357(2)
Gd-O(3)	2.399(2)
Gd-O(4)	2.429(3)
Gd-N(1)	2.503(2)
Gd-N(2)	2.519(2)
Gd-O(2)	2.537(2)
O(7) ⁱ -Gd-O(8) ⁱⁱ	94.61(7)
O(7) ⁱ -Gd-O(1)	78.87(7)
O(8) ⁱⁱ -Gd-O(1)	79.92(7)
O(7) ⁱ -Gd-O(3)	95.19(8)
O(8) ⁱⁱ -Gd-O(3)	154.17(8)
O(1)-Gd-O(3)	78.63(7)
O(7) ⁱ -Gd-O(4)	79.72(7)
O(8) ⁱⁱ -Gd-O(4)	77.30(7)
O(1)-Gd-O(4)	147.16(6)
O(3)-Gd-O(4)	128.02(6)
O(7) ⁱ -Gd-N(1)	84.38(7)
O(8) ⁱⁱ -Gd-N(1)	141.36(7)
O(1)-Gd-N(1)	136.83(6)
O(3)-Gd-N(1)	63.54(7)
O(4)-Gd-N(1)	64.48(6)
O(7) ⁱ -Gd-N(2)	144.01(8)
O(8) ⁱⁱ -Gd-N(2)	79.82(7)
O(1)-Gd-N(2)	65.14(7)
O(3)-Gd-N(2)	78.21(7)
O(4)-Gd-N(2)	132.02(7)
N(1)-Gd-N(2)	121.72(7)
O(7) ⁱ -Gd-O(2)	153.71(7)
O(8) ⁱⁱ -Gd-O(2)	92.57(7)
O(1)-Gd-O(2)	127.33(6)
O(3)-Gd-O(2)	89.11(7)
O(4)-Gd-O(2)	77.27(6)
N(1)-Gd-O(2)	74.37(6)
N(2)-Gd-O(2)	62.23(7)

Operações de simetria usadas para gerar os átomos equivalentes: ⁱ -x,y+1/2,-z+1/2; ⁱⁱ x,-y+1/2,z-1/2; ⁱⁱⁱ -x,y-1/2,-z+1/2; ^{iv} x,-y+1/2,z+1/2.

Tabela 5S. Coordenadas atômicas ($\text{Å}^2 \times 10^3$) e parâmetros de vibração térmica isotrópicos do $[\text{Gd}(\text{DPA})(\text{HDPA})]$.

	x	y	z	U(eq)
Gd(1)	1978(1)	2331(1)	3180(1)	10(1)
O(2)	3538(2)	287(2)	3471(2)	22(1)
N(1)	1362(2)	161(2)	4206(2)	13(1)
C(8)	602(2)	-997(3)	2611(2)	14(1)
O(3)	2313(2)	2760(2)	4972(2)	22(1)
C(9)	882(2)	-1146(3)	3747(2)	13(1)
C(14)	2074(2)	1825(4)	5619(0)	15(1)
C(2)	4847(3)	2385(4)	3737(2)	19(1)
C(6)	4113(2)	4918(3)	3572(2)	18(1)
C(12)	1377(2)	-1040(3)	5802(2)	18(1)
O(4)	1108(2)	41(2)	2227(1)	17(1)
C(13)	1585(2)	241(3)	5220(2)	14(1)
N(2)	3955(2)	3344(3)	3558(2)	16(1)
O(7)	-145(2)	-1906(2)	2128(1)	19(1)
C(1)	4640(2)	635(3)	3719(2)	21(1)
C(10)	656(3)	-2485(3)	4268(2)	17(1)
O(8)	2197(2)	2117(2)	6544(2)	21(1)
O(1)	2155(2)	5128(2)	3273(1)	20(1)
O(5)	5356(2)	-352(3)	3896(2)	37(1)
C(7)	3042(2)	5897(3)	3378(2)	21(1)
C(11)	954(3)	-2429(3)	5323(2)	20(1)
O(6)	3116(3)	7364(3)	3308(3)	47(1)
C(5)	5169(3)	5590(4)	3746(2)	26(1)
C(3)	5931(2)	2959(3)	3921(3)	28(1)
C(4)	6062(2)	4599(4)	3922(2)	29(1)

Tabela 6S. Coordenadas atômicas ($\text{Å}^2 \times 10^4$) e parâmetros de vibração térmica isotrópicos ($\text{Å}^2 \times 10^3$) dos átomos de hidrogênio do polímero de coordenação $[\text{Gd}(\text{DPA})(\text{HDPA})]$

	x	y	z	U(eq)
H(12)	1526	-964	6503	21
H(10)	326	-3385	3929	21
H(11)	848	-3323	5701	24
H(3)	6535	2236	4040	33
H(5)	5256	6691	3744	31
H(4)	6807	5024	4039	35
H(1)2	1530	-931	1527	32