

## Caracterização estrutural do composto *fac*-[Re(CO)<sub>3</sub>(phen)(bpa)]PF<sub>6</sub>

Silvana Guilardi<sup>1\*</sup> (PQ), Antônio Otávio de Toledo Patrocínio<sup>1</sup> (PQ), Sinval Fernandes de Sousa<sup>1</sup> (PG), Javier Ellena (PQ)<sup>2</sup> silvana@ufu.br

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG.

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP.

Palavras Chave: Complexos de rênio (I), difração de raios X, luminescência.

### Introdução

Complexos polipiridínicos de rênio(I) têm atraído muitos pesquisadores devido à grande versatilidade de aplicações. Estes complexos apresentam estabilidade térmica e fotoquímica, bem como luminescência intensa na região do visível proveniente dos estados excitados de transferência de carga do metal para o ligante (MLCT).

A caracterização das propriedades fotofísicas do complexo em estudo, *fac*-[Re(CO)<sub>3</sub>(phen)(bpa)]<sup>+</sup>, evidenciou que o mesmo apresenta alto rendimento quântico de emissão em solução a 298 K, associado ao estado <sup>3</sup>MLCT<sub>Re→phen</sub>. Desta forma, a luminescência do complexo pode ser convenientemente explorada no desenvolvimento de dispositivos moleculares<sup>1</sup>.

Descreve-se neste trabalho a caracterização por difração de raios X do composto *fac*-[Re(CO)<sub>3</sub>(phen)(bpa)]PF<sub>6</sub>, phen=1,10-fenantrolina e bpa = 1,2-bis-(4-piridil)etano.

### Resultados e Discussão

Monocristais adequados para difração de raios X foram obtidos após evaporação lenta de uma solução 1:2 de acetonitrila e éter. Os dados de raios X foram coletados em um difratômetro Nonius KappaCCD usando radiação MoK $\alpha$  (0,71073 Å) e corrigidos pelos fatores de Lorentz, polarização e absorção. A estrutura foi resolvida por métodos diretos e refinada por mínimos quadrados (F<sup>2</sup>), utilizando matriz completa.

O composto cristaliza no sistema monoclinico, grupo espacial P2<sub>1</sub>/n. Na unidade assimétrica, há um cátion, um anion e uma molécula do solvente acetonitrila (Figura 1). O metal central Re(I) apresenta geometria octaédrica distorcida. A esfera de coordenação é ocupada por três ligantes carbonil arranjados em uma disposição facial e três átomos de nitrogênio, sendo dois da 1,10-fenantrolina e um do ligante bpa. A geometria ao redor do íon rênio(I), os comprimentos e ângulos de ligação dos ligantes estão dentro dos valores esperados e concordam com os observados em compostos correlatos<sup>2,3</sup>. O ânion PF<sub>6</sub><sup>-</sup> tem simetria octaédrica com distância P-F média de 1,604(4) Å. As distâncias e ângulos de ligação na molécula de acetonitrila estão dentro dos valores esperados.

No ligante bpa, os comprimentos de ligação C-N variam de 1,346(6) Å a 1,353(7) Å. A distância da ligação C(21)-C(22) é de 1,526(8) Å. Os ângulos de torção C21-C22-C23-C24 e C21-C22-C23-C27 são 102,5(7)° e -75,2(8)°, respectivamente. No ligante livre, esses ângulos são de 78,0(3)° e -99,5(3)°, respectivamente. Os comprimentos de ligação na estrutura do ligante livre<sup>4</sup> são menores do que os observados no ligante complexado ao centro metálico.

No empacotamento cristalino, há duas interações do tipo C-H...F entre o cátion e o ânion da unidade assimétrica, envolvendo hidrogênios dos ligantes phen e bpa. Observa-se ainda seis interações C-H...F entre cátions e ânions e uma C-H...O entre cátions relacionados por simetria.

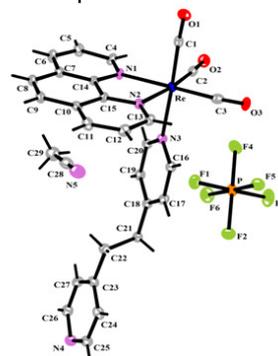


Figura 1- Representação ORTEP do composto em estudo.

### Conclusões

Determinou-se por DRX a estrutura cristalina de um composto de Re(I) inédito, com potencial aplicação em dispositivos moleculares, como diodos emissores de luz (LEDs) e sensores luminescentes.

### Agradecimentos

À FAPEMIG, CNPq, CAPES e Rede Mineira de Química.

<sup>1</sup>Sousa, S. F.; Machado, A. E. H.; Barbosa, N. M.; Patrocínio, A. O. T. *36ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química*, **2013**, FOT027.

<sup>2</sup>Wenger, O. S.; Henling, L. M.; Day, M. W.; Winkler, J. R.; Gray, H. B. *Inorg. Chem.* **2004**, *43*, 2043.

<sup>3</sup>Ranjan, S.; Lin, S. -Y.; Hwang, K. -C.; Chi, Y.; Ching, W. -L.; Liu C., - S. *Inorg. Chem.* **2003**, *42*, 1248.

<sup>4</sup>Ide, S.; Karacan, N.; Tufan, Y. *Acta Cryst.* **1995**, *C51*, 2304.