

## Uma nova estrutura cristalina/molecular de Pb(II) com um ligante tiossemicarbazona

BANDEIRA, Katlen C.T.<sup>1</sup>(PG); BARBOSA, Mauricio H.<sup>1</sup>(IC); BRESOLIN, Leandro<sup>1</sup>(PQ)\*; GERVINI, Vanessa C.<sup>1</sup>(PQ); OLIVEIRA, Adriano B. de.<sup>2</sup>(PQ); CARROCCIA, Murilo C.<sup>3</sup>(PG); DEFLON, Vitor M.<sup>3</sup>(PQ)

<sup>1</sup>Universidade Federal do Rio Grande – Escola de Química e Alimentos.

<sup>2</sup>Universidade Federal de Sergipe – Centro de Ciências Exatas e Tecnologia.

<sup>3</sup>Universidade de São Carlos – Instituto de Química de São Carlos.

\*leandro\_bresolin@yahoo.com.br

Palavras Chave: Tiossemicarbazona, Chumbo(II), Geometria Hemedirigida.

### Introdução

O íon chumbo bivalente apresenta configuração eletrônica  $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^2$  e é um íon metálico de pós-transição que exibe o chamado “efeito do par inerte”, ou seja, a resistência do par de elétrons da camada de valência do Pb(II) em remover ou participar de ligações covalentes e ligações de hidrogênio<sup>1</sup>. A química dos compostos de coordenação do íon Pb(II) é influenciada pelos pares de elétrons  $6s^2$ , os quais podem ou não desempenhar um papel importante na estereoquímica de seus complexos<sup>2</sup>. O presente trabalho tem como objetivo descrever a estrutura cristalina/molecular de um complexo de Pb(II) com o ligante 5-nitroisatina-4-fenil-3-tiossemicarbazona.

### Resultados e Discussão

O complexo de Pb(II) foi obtido a partir da reação de complexação do ligante 5-nitroisatina-4-fenil-3-tiossemicarbazona com o acetato de chumbo, utilizando uma reação com relação molar 2:1, em THF. Os monocristais aptos para difração de raios-X, foram obtidos em DMF, apresentando uma coloração avermelhada e ponto de fusão com decomposição em 296°C. O composto apresenta geometria octaédrica hemedirigida bastante distorcida com duas moléculas de DMF como solvato de cristalização que foram omitidos na Fig.1. A distorção do octaedro se dá em razão do par de elétrons isolados estereoquimicamente ativo que proporciona ao composto uma lacuna significativa ao redor da geometria de coordenação do íon Pb(II), que pode ser constada pelos ângulos das ligações  $N8-Pb-O3=137.0(2)^\circ$  e  $N8-Pb-N3=131.8(2)^\circ$  e pelos comprimentos das ligações  $Pb-N$ , que para complexos com pares isolados ativos apresentam-se no intervalo de 2.62-2.88 Å<sup>3</sup> e o composto ora descrito apresenta distâncias  $Pb-N$  de 2.699(6) e 2.668(5). A distância  $Pb-O$  em 2.949(6) está acima da soma dos raios iônicos (2,12) e abaixo das somas dos raios de van der Waals (3,26), caracterizando-se como um átomo doador fracamente coordenado. O composto cristalizou no sistema triclinico e grupo espacial *P*-1. A cela unitária apresenta  $Z=2$  e  $a=7.9506(15)$ ,  $b=15.132(3)$ ,  $c=17.871(3)$  e  $\alpha=72.066(10)$ ,  $\beta=77.785(10)$ ,  $\gamma=80.787(11)$ . O índice de discordância para  $l>2\sigma(l)$  é igual a  $R_1=0.0500$  e  $wR_2=0.1328$ .

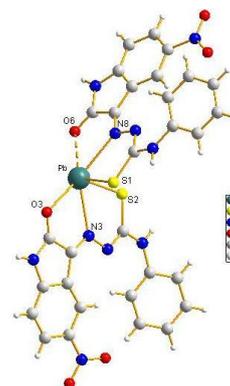


Figura 1. Complexo de Pb(II) com o ligante 5-nitroisatina-4-fenil-3-tiossemicarbazonato.

### Conclusões

A geometria de coordenação do complexo de chumbo(II) apresentado é influenciada pelo par de elétrons isolado estereoquimicamente ativo, obtendo-se um composto de geometria hemedirigida. Além disso, foi comprovado o potencial modo de coordenação quelante dos ligantes isatina-3-tiossemicarbazona frente a íons chumbo(II).

### Agradecimentos

DECIT/SCTIE-MS-CNPq-FAPERGS-Pronem-11/2029-1 PRONEX FAPERGS/CNPq 10/0009-2 UFSM; FAPEAM.

<sup>1</sup> Shimoni-Livny et al. *Inorg. Chem.* **1988**, 37,1853-1867.

<sup>2</sup> R.D. Hancock, in: A.F. Williams, C. Floriani, A.E. Merbach (Eds.), *Perspectives in Coordination Chemistry*, VCHA:VCH, Basel, **1992**, p. 129.

<sup>3</sup> Pellissier et al. *Inorg. Chem.* **2007**, 46, 3714-3725.