

Síntese e determinação estrutural via difração de raios-X em monocristal de um complexo *cis*-anagóstico de Ni(II)/tetralona-1-tiossemicarbazona com dicroísmo

Barbara R. S. Feitosa^{1*} (IC), **Adriano Bof de Oliveira¹** (PQ), **Christian Näther²** (PQ), **Inke Jess²** (PQ)
Johannes Beck³ (PQ)

*barbara.chemistry@gmail.com

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

2- Institut für Anorganische Chemie, Universität Kiel, D-24118 Kiel, Alemanha

3- Institut für Anorganische Chemie, Universität Bonn, D-53121 Bonn, Alemanha

Palavras Chave: Tiossemicarbazonas, complexo de níquel, difração de raios-X, *cis*-anagóstico, dicroísmo

Introdução

As tiossemicarbazonas (TSC's) são uma classe de compostos orgânicos pertencentes às bases de Schiff. Sua complexação a metais gera compostos de coordenação com propriedades singulares relativas a essa classe. No presente trabalho foi sintetizado e caracterizado por difração de raios-X em monocristal um complexo de Ni(II) com o ligante tetralona-1-tiossemicarbazona (TTSC)¹. O complexo obtido apresenta dicroísmo que é um fenômeno comum em cristais com estrutura cristalina de pouca simetria (Lista 1), porém nunca reportado em complexos derivados de TSC's.

Resultados e Discussão

O complexo foi obtido pela reação entre a TTSC e o acetato de Ni(II) tetra hidratado, numa proporção estequiométrica de 2 TTSC : 1 Ni(II), em CH₃OH, com agitação magnética à temperatura ambiente por 4 h. Cristais adequados para a difração de raios-X em monocristal foram obtidos pela lenta evaporação do solvente em condições ambientes.

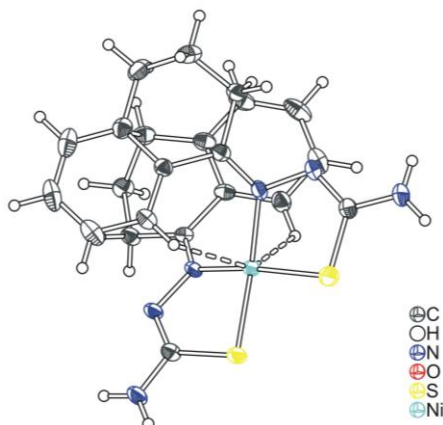


Figura 1. Representação do ORTEP (50%) da esfera de coordenação do complexo de Ni^{II}-TTSC.

A esfera de coordenação do Ni(II) é formada pelos átomos de N e S do fragmento tiossemicarbazona coordenados na conformação “*cis*”, numa geometria

quadrática planar distorcida. Como o átomo de Ni(II) é d^8 , seus orbitais dz^2 preenchidos permitem a formação de duas interações H---Ni do tipo 3 centros 2 elétrons de natureza eletrostática. Essas interações é que atuam na geometria do complexo. Na estrutura cristalina, as moléculas de complexo estão conectadas entre si por interações de hidrogênio do tipo N-H---N dos fragmentos tiossemicarbazona e N-H---O com as moléculas de solvato, formando um polímero de interações de hidrogênio, onde as moléculas de CH₃OH atuam como solvato, estabilizando a estrutura no estado sólido.

Lista 1. Lista dos dados cristalográficos básicos.

Fórmula: C ₂₃ H ₂₆ N ₆ Ni O S ₂	
Grupo Espacial: <i>P</i> -1	Triclínico
<i>a</i> = 10,2279 (7) Å	<i>V</i> = 2270,0 (6) Å ³
<i>b</i> = 13,8737(11) Å	<i>Z</i> = 4
<i>c</i> = 17,1552(11) Å	Radição: Mo, K α
α = 102,035(9)°	wR(F ²) = 0,0812
β = 101,997(8)°	[F ² > 2 σ (F ²)] = 0,0398
γ = 99,806(9)°	<i>T</i> = 200 K

Foi observado o fenômeno de dicroísmo no cristal do complexo, o que é uma consequência da baixa simetria do sistema triclinico que o cristal possui. As causas desse dicroísmo estão sendo estudadas.

Conclusões

Foi sintetizado e caracterizado por difração de raios-X em monocristal o complexo Ni(TTSC)₂ · CH₃OH. A presença de interações anagósticas² e de dicroísmo é incomum nessa classe de compostos.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Prof. W. Bensch (Kiel) pelo acesso à instrumentação científica. B. R. S. F. agradece ao PIBIC/CNPq/UFS pela bolsa.

¹ Oliveira, A.B.; Silva, C.S.; Feitosa, B.R.S.; Näther, C. e Jess, I., *Acta Cryst.* **2012**, E68, o2581.

² Oliveira, A.B.; Silva, C.S.; Feitosa, B.R.S.; Näther, C. e Jess, I., *Acta Cryst.* **2014**, E70, 101-103.