

## Síntese e Estrutura do Complexo 3-(4-carboxilatofenil)-1-metiltriazeno 1-óxido de potássio tetrahidratado (1).

Aline Joana R. W. A. dos Santos<sup>1</sup> (PG), Bernardo A. Iglesias (IC)<sup>1</sup>, Paulo R. Martins (IC)<sup>1</sup>,  
Manfredo Hörner\*<sup>1</sup> (PQ).  
hoerner@smail.ufsm.br

<sup>1</sup> Núcleo de Pesquisa de Triazenos e Complexos - NITriCo, Departamento de Química, UFSM, Cx. Postal 5056, 97.110-900, Santa Maria-RS.

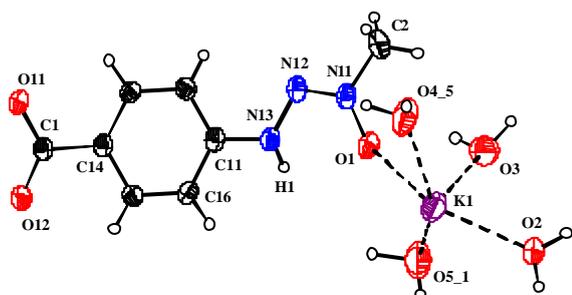
Palavras Chave: triazeno 1-óxido, complexo, potássio.

### Introdução

Triazenos 1-óxido são alvo de estudos químicos e cristalográficos envolvendo diversos metais estratégicos, principalmente com papel bioinorgânico. É o caso do complexo (1) que envolve o íon potássio, sendo este um metal essencial aos sistemas biológicos, principalmente em relação ao transporte dos nutrientes pelas membranas celulares<sup>1</sup>. O objetivo da síntese do complexo (1) e a obtenção de monocristais foi a avaliação de uma estrutura cristalina inédita entre o íon triazenido 1-óxido e K<sup>+</sup>, cujo principal modo de coordenação normalmente envolve um anel quelato inorgânico de cinco membros com o metal.

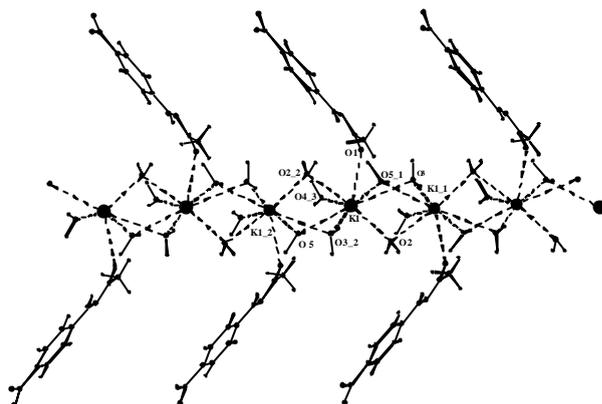
### Resultados e Discussão

Monocristais do complexo (1), com coloração levemente amarelada, e adequados para a análise estrutural por difração de raios-X foram obtidos pela evaporação lenta, durante três semanas, de uma solução contendo 0,098g do pró-ligante 1-metil-3-(*p*-carboxifenil)triazeno 1-óxido e 0,03g de hidróxido de potássio em metanol hidratado e piridina. A estrutura cristalina do complexo (1) reúne quatro moléculas discretas na cela elementar referentes a um sistema cristalino monoclinico e grupo espacial  $P2_1/c$ , sendo os índices de discordância finais  $[I > 2s(I)] R_1 = 0,0554$  e  $wR_2 = 0,1705$ . Além da análise estrutural por difração de raios-X, o complexo (1) também foi caracterizado por ponto de fusão, sendo o ponto de decomposição maior que 200°C, e por espectrometria no infravermelho.



**Figura 1.** Projeção da estrutura molecular do par iônico do complexo (1), K<sup>+</sup> [C<sub>8</sub>H<sub>9</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>]<sup>-</sup> · 4H<sub>2</sub>O, incluindo a interação de quatro moléculas de água e

do átomo de oxigênio do ligante 3-(4-carboxilatofenil)-1-metiltriazeno 1-óxido com o íon potássio.



**Figura 2** Projeção com seis unidades do complexo K<sup>+</sup> [C<sub>8</sub>H<sub>9</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>]<sup>-</sup> · 4H<sub>2</sub>O (1) na direção [001], evidenciando a formação de uma cadeia independente ao longo da direção cristalográfica [010], através de um eixo de rotação-translação 2<sub>1</sub> paralelo ao eixo cristalográfico *b*.

### Conclusões

Na estrutura polimérica do complexo (1) o ligante metiltriazeno 1-óxido encontra-se protonado na cadeia –N(H)–N=N(O)– e coordenado ao metal através do oxigênio ligado ao nitrogênio da cadeia diazoamínica, não havendo, portanto, a formação de um anel quelato inorgânico de cinco membros. Em relação ao número de coordenação, que é oito, o íon potássio apresenta-se coordenado pelo 1-metil-3-(*p*-carboxilatofenil)triazeno 1-óxido e por moléculas de água, sendo que a geometria de coordenação envolve uma distorção semelhante à estrutura do enxofre elementar S<sub>8</sub> na conformação de barco com simetria ideal C<sub>2v</sub>.

### Agradecimentos

CNPq, FIPE-UFSM, FAPERGS.

<sup>1</sup> Kaim, W., Schewederski, B, *Biinorganic Chemistry: Inorganic Elements in the Chemistry of Life* **1991**, 1<sup>st</sup> ed., Stuttgart: Wiley.

<sup>2</sup> Santos, A.J.R.W.A.dos, *Dissertação de Mestrado* **2005**, Santa Maria, UFSM-RS.

<sup>3</sup> Goswami, A.K., Purohit, D.N., *Analytical Sciences*, **2001**, 17, Supplement.

<sup>4</sup> Gantzel, P., Walsh, P.J., *Inorg. Chem.* **1998**, 37, 3450.

