

SÍNTESE E ESTRUTURA CRISTALINA DO COMPLEXO DE Hg(II) COM O LIGANTE 1,3-BIS(2-BROMOFENIL)TRIAZENIDO

Ângela Silva¹ (PG), Lorenzo do Canto Visentin (PG)^{1*}, Manfredo Hörner¹(PQ). visentin72@yahoo.com.br

¹Núcleo de Investigação de Triazenos e Complexos/NITriCo/ Departamento de Química/ UFSM/ Santa Maria/ RS CEP 97110-970.

Palavras Chave: triazenos, complexo de Hg(II), difração de raios-X.

Introdução

Os triazenos são um grupo de compostos orgânicos com uma longa história¹. Griess em 1859 sintetizou o 1,3-bisfeniltriazeno e derivados como as primeiras moléculas incluindo uma cadeia aberta com três átomos de nitrogênio em seqüência².

Desde então, a química de coordenação com ligantes catenados de nitrogênio, incluindo os derivados de triazenos, tem apresentado um apreciável crescimento. Triazenos também possuem importantes aplicações médicas e industriais, além de alguns apresentarem atividade biológica, sendo utilizados no tratamento de câncer³. No presente trabalho será relatado a caracterização estrutural cristalina por difração de raios-X em monocristal do complexo de Hg(II) com o ligante 1,3-bis(2-bromofenil)triazenido.

Resultados e Discussão

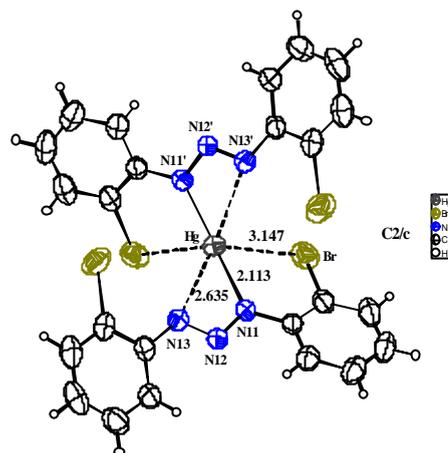
METODOLOGIA

O complexo $[\text{Hg}(\text{II})(\text{BrC}_6\text{H}_4\text{NNNC}_6\text{H}_4\text{Br})_2]$ (**1**) foi obtido através da reação entre acetato de mercúrio(II) monohidratado e o ligante livre 1,3-bis(2-bromofenil)triazeno dissolvidos em metanol/THF. O precipitado amarelo obtido foi dissolvido em piridina. Monocristais obtidos do meio de recristalização e apropriados para difração de raios-X, apresentaram ponto de fusão de 182 °C.

RESULTADOS

A coleta de dados para o complexo (**1**) foi realizada em um difratômetro Bruckel ApexII-CCD. A coleta de dados e o refinamento da estrutura apresentam: FM = $\text{HgBr}_4\text{N}_6\text{C}_{24}\text{H}_{16}$; $M = 892,23 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$; 295(2) K; sistema cristalino monoclinico; grupo espacial C2/c; $a = 23,0736(5) \text{ \AA}$; $b = 7,8260(2) \text{ \AA}$; $c = 14,7387(3) \text{ \AA}$; $\beta = 99,66(0)^\circ$; $V = 2623,70(46) \text{ \AA}^3$; $Z = 4$; $R_1 = 0,0370$; $wR_2 = 0,1187$. A solução da estrutura e o refinamento foram obtidos com os programas SHELXS 97 e SHELXL 97, respectivamente.

Figura 2. Projeção da estrutura molecular do complexo (**1**).



Os ligantes triazenido apresentam um ângulo diédrico de 58,1°. Os átomos de Br na posição 2 dos grupos arila terminais exercem um forte efeito estérico sobre o centro metálico, resultando em ligações polarizadas do tipo Hg...Br. Desta forma, a proteção do centro metálico impede a coordenação de outros ligantes, como no caso a piridina presente no meio de recristalização.

Conclusões

A utilização de ligantes triazenido, estrategicamente substituídos por grupos arila terminais contendo Br na posição orto do anel aromático, demonstra forte efeito estérico sobre o metal coordenado, destruindo a planaridade esperada para o complexo. Paralelamente observa-se o impedimento da coordenação de outros ligantes além dos triazenidos no ambiente de coordenação do íon Hg(II).

Agradecimentos

CNPq, CAPES

¹ Lazni, R.; Nodzevska, A. e Klosowski, P., *Tetrahedron* **2004**, *60*, 121-130.

² Griess, P., *Proc. Roy. London*, **1859**, 9,594; *Ann. Chim. Paris*, **1861**, 117, 1; *Ann. Chim. Paris*, **1862**, 121, 257.

³ Lippert, T. e Wokaum, A., *Makromol. Chem., Rapid Commun.*, **1993**, *14*, 365-369.