SÍNTESE E ESTRUTURA CRISTALINA DE UM COMPLEXO BINUCLEAR DE Cu(II) COM O LIGANTE 1,3-BIS(2-FLUOROFENIL)TRIAZENO

Aline Marques da Silva[1*](PG), Bernardo A. Iglesias[1](IC), Herton Fenner[1](PQ), Manfredo Hörner[1](PQ)
bittymarques@bol.com.br

[1]Núcleo de Investigação de Triazenos e Complexos/NITriCo/ Departamento de Química/ UFSM/ Santa Maria/ RS CEP 97110-970 (www.ufsm.br/nitrico)

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

Introdução

Os triazenos configuram-se como importantes membros da família dos compostos nitrogenados contendo cadeias abertas com três átomos de nitrogênio em seqüência[1]. Apresentam habilidades de impor a centros metálicos determinadas geometrias de coordenação, em função da especificidade de sua estrutura eletrônica e também das possibilidades de derivação dos substituintes dos nitrogênios terminais, surgindo assim, uma série de compostos análogos substituídos. Neste trabalho será relatado a caracterização estrutural cristalina por difração de raios-X do complexo de Cu(II) com o ligante 1,3-bis(2-fluorofenil)triazeno, evidenciando uma interação metal-metal formada pelos átomos de Cu1 e Cu2.

Resultados e Discussão

METODOLOGIA

O complexo $[Cu_2(FC_6H_4NNNC_6H_4F)_4]$ **(1)** foi obtido por meio da reação envolvendo acetato de cobre (II) sólido com o respectivo ligante 1,3-bis(2-fluorofenill)triazeno desprotonado em meio MeOH/CH_3COONa/Py, numa proporção de 1:2 (M:L).

Monocristais verde-escuro apropriados para difração de raios-X foram obtidos por evaporação lenta da solução- mãe, após um repouso de duas semanas.

RESULTADOS

A coleta de dados para o complexo **(1)** foi realizada em um difratômetro Bruker ApexII- CCD e o refinamento da estrutura reúne respectivamente: Sistema cristalino *Monoclínico*, grupo espacial $P(2_1/c)$, l (MoK_α) = 0,71069Å , ***a*** = 22,760(5)Å, ***b*** = 11,095(5) Å, ***c*** = 18,691(5)Å, b = 101,84(5)°, ***Z*** = 4, D_x = 1,543mg/m^3, R_1 = 0,0780, wR_2 = 0,1740. Destacam-se os seguintes comprimentos(Å) e ângulos de ligação(°): Cu1...Cu2 = 2,463(12), Cu...F = 2,592 - 2,838, Cu1-N31 = 2,028(6), Cu1-N21 = 2,009(6), Cu1-N11 = 1,983(6), Cu1-N41 = 2,036(6), Cu2-N13 = 2,030(6), Cu2-N33 = 2,011(6), Cu2-N43 = 2,033(5), Cu2-N23 = 1,998(6), N11-Cu1- N21= 168,3(2), N21-Cu1- N31= 88,5(2), N23 -Cu2 -N13 =166,4(2), N33 -Cu2- N43 =169,6(2). A solução da estrutura e o refinamento foram obtidos aplicando-se os programas SHELXS 97 e SHELXL 97 respectivamente[2].

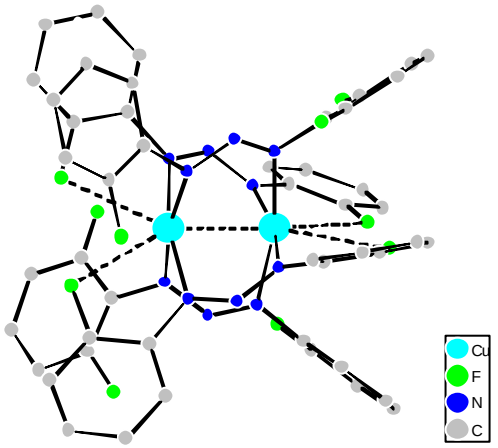

Figura 1. Projeção da estrutura molecular do complexo **(1)**. Átomos de hidrogênio foram omitidos para maior clareza. Código de simetria para átomos equivalentes (não simbolizados na figura): -x, -y,-z[3].

Conclusões

A estrutura cristalina e molecular do complexo binuclear $[Cu_2(FC_6H_4NNNC_6H_4F)_4]$, avaliada a temperatura ambiente, caracteriza-se por uma desordem das posições cristalográficas dos átomos de flúor dos grupos substituintes terminais dos anéis fenila.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPERGS.

[1]BRESOLIN, L.; Tese de Doutorado **2003** UFSM/BRASIL.
[2]Sheldrick,G.M. *SHELXS-97*; *Program for Crystal Structure Solution*, University of Göttingen, **1990**, Germany.
[3]HAHN, T.; *International Tables for Crystallography*; vol. A Space-Group Symmetry, 2d. Ed., The International Union of Crystallography, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, **1987**, Holland.