

Síntese e Estrutura Cristalina do Complexo de Hg(II) com o Ligante 1,3-bis(fenil)triazenido

Leandro Renato Simon de Camargo¹(IC)^{*}, Lorenzo de Canto Visentin¹(PG), Paulo Cesar Mendes Villis¹(PG), Herton Fenner¹(PQ), Manfredo Hörner¹(PQ).
leandro.simong@gmail.com

¹Núcleo de Investigação de Triazenos e Complexos – NITriCo - Departamento de Química - Universidade Federal de Santa Maria – UFSM, 97105-900, Santa Maria-RS.

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

Introdução

Os triazenos¹ são compostos orgânicos caracterizados pelo grupo (N=N-NH). A química dos triazenos data de 1859, quando Griess sintetizou o primeiro triazeno, 1,3-bis(fenil)triazeno.¹ A descrição compreensiva desta molécula foi relatada por F.A. Benson no livro *The High Nitrogen Compounds* em 1984.¹ Moléculas de triazenos tornaram-se fontes de diversas pesquisas científicas, devido ao grau de aplicações em várias áreas do conhecimento, inclusive na medicina para o combate ao câncer. As propriedades estruturais de ânions triazenidos são formalmente análogos ao anion nitrito, O=N-O⁻.

Três formas diferentes de complexos de mercúrio(II) com triazenos são esperados, HgX₂[ArNNN(H)Ar]₂, Hg(ArNNNAr)₂, HgX(ArNNNAr) (X = halogênio, acetato, arilas, etc.)

Neste trabalho relatamos a estrutura cristalina do complexo bis-[1,3-bis(fenil)triazenido]mercúrio(II), [Hg(II)(C₆H₅NNNC₆H₅)₂].

Resultados e Discussão

METODOLOGIA

O complexo [Hg(II)(C₆H₅NNNC₆H₅)₂] (**1**) foi obtido através da reação entre acetato de mercúrio(II) monohidratado e 1,3-bis(fenil)triazeno previamente desprotonado com sódio metálico em metanol. Obteve-se um precipitado amarelo que foi isolado e recristalizado em piridina, dando origem a monocristais aptos para difração de raios-X, com ponto de fusão de 185 -190 °C.

RESULTADOS

A coleta de dados para (**1**) foi realizada em um difratômetro Brucker ApexII-CCD. A molécula (**1**) apresenta a simetria cristalográfica local (-1) e pertence ao sistema cristalino *trigonal* com o grupo espacial centrossimétrico *R*(-3) (nº. 148). O refinamento da estrutura foi realizado com o programa SHELXL-97.² O refinamento e a coleta de dados reúnem: FM = C₂₄H₂₀N₆Hg; M = 598,38g; T = 293(2) K; a = b = 32,790(11) Å, c = 5,4247(3) Å; b = 99,66(0)°, Z = 9; R₁ = 0,0439, wR₂ = 0,1166; V = 2623,70(46) Å³.

Os principais parâmetros geométricos são (Å,°): Hg-N1 = 2,068; N1-N2 = 1,324; N2=N3 = 1,301; N1-N2=N3 = 111,3.

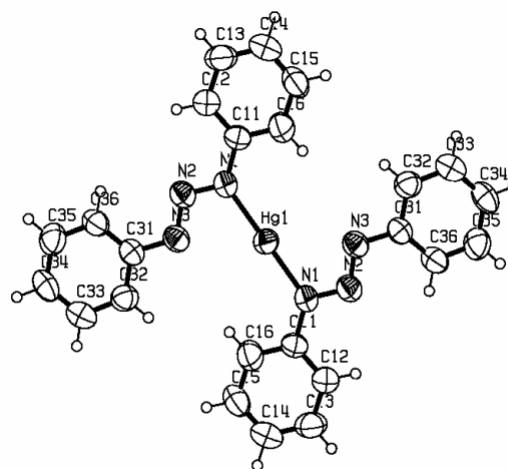


Figura 1. Projeção da estrutura molecular de (**1**). Elipsóides térmicas com 50% de probabilidade.

A geometria de coordenação do mercúrio é linear com o ângulo ideal entre os átomos N1-Hg-N1_01 de 180°. A molécula apresenta um pequeno desvio da planaridade visto que o ângulo interplanar entre os anéis C11-C16 e C31-C36 é 7,95°.

Conclusões

O ambiente de coordenação do átomo de mercúrio envolve um pequeno desvio da planaridade. A geometria de coordenação linear para o centro metálico é comprovada através do ângulo entre os átomos N1-Hg-N1_01 de 180°. O ligante triazenido não causa nenhum efeito estérico sobre o ambiente de coordenação do centro metálico.

Agradecimentos

CNPq, CAPES

¹ Moore, D.S. & Robinson, S.D.; *Adv. Inorg. Chem. Radiochem*, **1986**, 30, 1-68.

² Sheldrick, G. M. SHELXL-97; *Program For Crystal Structure Refinement*, **1997**, University of Göttingen, Germany.