

SÍNTESE E ESTRUTURA CRISTALINA DO COMPLEXO DE Hg(II) COM O LIGANTE 1-(3-TRIFLOROMETILFENIL)-3-(3-NITROFENIL) TRIAZENIDO

Estela dos Reis Crespan^{*1} (PG), Mariana B. Behm¹(PG), Vinícius F. Giglio¹(PG), Manfredo Hörner¹(PQ)
estelacrespan@yahoo.com.br

¹Núcleo 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 Hg(II), difração de raios-X.

Introdução

Compostos pertencentes aos sistemas nitrogenados de cadeia aberta, como os triazenos apresentam uma química estrutural bastante rica, podendo atuar como ligantes em complexos metálicos, e ainda contribuir para a formação de arranjos supramoleculares no estado sólido. Interações intermoleculares via ligações de hidrogênio originam estes arranjos, que podem auxiliar na elucidação de questões relacionadas, por exemplo, com as propriedades químicas dos compostos¹. Neste trabalho será relatado a caracterização estrutural cristalina por difração de raios-X do complexo de Hg(II) com o ligante 1-(3-trifluoro- metilfenil)-3-(3-nitrofenil)triazeno, evidenciando as interações do tipo C-H...O que originam cadeias de moléculas que por sua vez arranjam-se de forma centrossimétrica umas relativas às outras, formando um arranjo supramolecular bidimensional através de interações intermoleculares do tipo C-H...F.

Resultados e Discussão

METODOLOGIA

O complexo $\text{Hg}(\text{CF}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{NNNC}_6\text{H}_4\text{NO}_2)_2(\text{C}_{18}\text{H}_{15}\text{P})$ (**1**) foi obtido por meio da reação envolvendo acetato de mercúrio(II) e o ligante 1-(3-nitrofenil)-3-(3-trifluorometilfenil)triazeno e trifenilfosfina, em metanol, apresentando um ponto de fusão de 202 °C. Um monocristal amarelo de (**1**) obtido por evaporação lenta da solução - mãe, de (0,08 x 0,155 x 0,504) mm, foi utilizado para a coleta de dados de difração (difratômetro Bruker Apex II - ccd) para a análise estrutural, sendo feita ainda a caracterização através de espectroscopia na região do infravermelho, onde uma das principais bandas características é a da região de 1349 cm^{-1} referente a ? (NNN).

RESULTADOS

A coleta de dados para o complexo (**1**) e o refinamento da estrutura reúne respectivamente: $FM = \text{C}_{44}\text{H}_{31}\text{F}_6\text{HgN}_8\text{O}_4\text{P}$, $M_r = 1081,33$ g, $T = 293(2)$ K, geometria trigonal-distorcida, sistema cristalino triclinico, grupo espacial $P(-1)$, $\lambda (\text{MoK}_\alpha) = 0,71073\text{\AA}$, $a = 11,8334(3)\text{\AA}$, $b = 13,7747(3)\text{\AA}$, $c =$

$15,3909(4)\text{\AA}$, $a = 75,955(10)^\circ$, $b = 70,8900(10)^\circ$, $g = 65,9750(10)^\circ$, $Z = 2$, $D_x = 1,672 \text{ Mg/m}^3$, $R_1 = 0,0525$, $W_{r2} = 0,1342$. Solução e refinamento da estrutura²: mínimos quadrados, matriz completa incluindo F^2 . Destacam-se os seguintes comprimentos (Å) e ângulos de ligação (°): Hg-P = 2,426(10), Hg-N11 = 2,288(4), Hg-N13 = 2,544(4), Hg-N31 = 2,267(4), Hg-N33 = 2,567(4), N11-Hg-N31 = 101,57(13) e N13-N33 = 114,19(14).

A Figura 1 mostra um arranjo de uma sequência de duas cadeias centrossimétricas de moléculas do complexo (**1**), paralelas a direção cristalográfica [101], destacando-se as interações intermoleculares secundárias do tipo C-H...O e C-H...F.

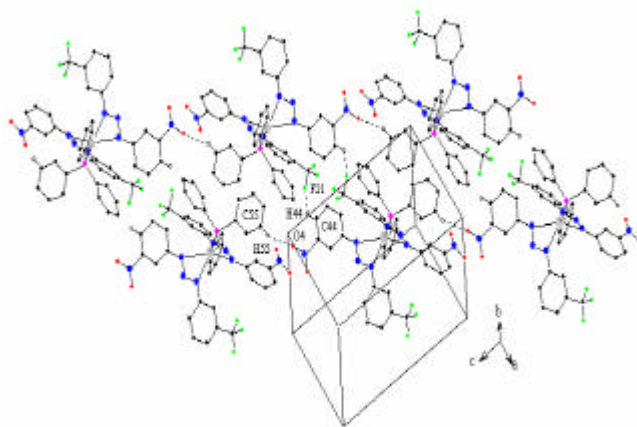


Figura1. Projeção da cela elementar de (**1**) incluindo uma projeção bidimensional de duas cadeias centrossimétricas de moléculas do complexo na direção [101].

Conclusões

As moléculas do complexo (**1**) associam-se através de interações intermoleculares secundárias, do tipo C-H...O e C-H...F contribuindo para um arranjo supramolecular bidimensional (2D) deste composto no estado sólido. Os grupos substituintes terminais dos anéis fenila nos compostos triazenos, podem contribuir significativamente para a ocorrência destas interações.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPERGS

¹Crespan, E.R.; *Dissertação de Mestrado*, 2005.

³Sheldrick, G.M. (1997). SHELXS 97 and SHELXL 97. University of Göttingen, Germany.