

## Síntese e caracterização de novas espécies pirazólicas de níquel (II).

Pedro M. Takahashi (PG)\*, Adelino V. G. Netto (PQ), Antonio E. Mauro (PQ), Regina C. G. Frem (PQ)

\* pedrtaka@posgrad.iq.unesp.br

Instituto de Química de Araraquara, UNESP, Araraquara-SP.

Palavras Chave: níquel, pirazóis, nitrato.

### Introdução

Ligações coordenadas e de hidrogênio desempenham um papel vital na construção de estruturas inorgânicas complexas<sup>1</sup>. Neste contexto, os pirazóis destacam-se pela versatilidade de seus modos de coordenação, bem como pela presença de um átomo de N pirrólico capaz de atuar como doador de ligações de hidrogênio. Dando continuidade ao trabalho do nosso grupo sobre compostos pirazólicos<sup>2</sup>, apresentamos a síntese e caracterização de três novos complexos de Ni(II) de fórmula geral  $[Ni(H_2O)_2L_4](NO_3)_2$  {L = HPz, Pirazol (1); HdmPz, 3,5-dimetilpirazol (2); HIPz, 4-iodopirazol (3)}.

### Resultados e Discussão

Os compostos 1-3 foram sintetizados pela reação entre o sal  $Ni(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$  e os respectivos ligantes pirazólicos na proporção 1:4 em solução aquosa. Os dados de análise elementar concordam com as fórmulas propostas: obt. (calc.) **1**, %C = 29,35 (30,46); %N = 28,53 (29,62); %H = 4,11 (3,84); **2** obt. (calc.): %C = 38,42 (39,82); %N = 22,74 (23,23); %H = 5,90 (6,03); **3** obt. (calc.): %C = 14,80 (14,49); %N = 13,48 (14,08); %H = 1,56 (1,62).

A Tabela 1 apresenta os principais dados de espectroscopia no IV para os compostos 1-3.

**Tabela 1.** Dados de espectroscopia no IV ( $cm^{-1}$ ) e atribuições para os complexos 1-3

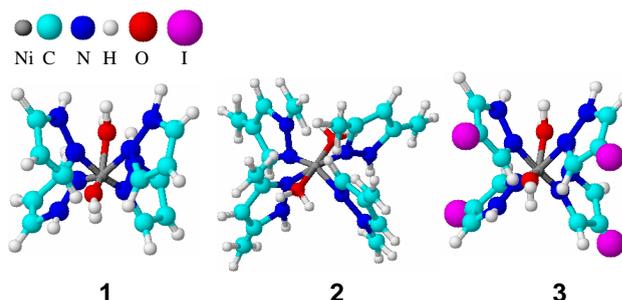
| Composto | $\nu_{NH}$ | $\nu_{CH}$ | $\delta_{HOH}$ | $\nu_{anel}$ | $\nu_{ONO}$ |
|----------|------------|------------|----------------|--------------|-------------|
| 1        | 3300       | 3134       | 1645           | 1523         | 1361        |
| 2        | 3467-3317  | -          | 1643           | 1584         | 1396-1332   |
| 3        | 3398       | 3130       | 1645           | 1517         | 1381        |

A coordenação dos ligantes pirazólicos em 1-3 no modo neutro monodentado foi diagnosticada via espectroscopia no IV pelas presenças de bandas características em 3467-3300 ( $\nu_{NH}$ ) e 1584-1517 ( $\nu_{anel}$ )  $cm^{-1}$ . Ainda pode ser observada nestes espectros, uma banda em 1645-1643 ( $\delta_{HOH}$ ) e uma outra banda intensa e larga em 1396-1332 ( $\nu_{ONO}$ )  $cm^{-1}$ , evidenciando respectivamente, a presença de água coordenada e de nitrato iônico<sup>3</sup> nestes complexos.

Os compostos 1-3 apresentaram valores de condutância molar, em metanol, na faixa de 200-227  $\mu S \cdot cm^{-1}$ , situando-se no intervalo de eletrólito<sup>4</sup> 1:2 e concordando com os dados espectroscópicos mencionados anteriormente.

Os espectros eletrônicos na região do UV-Vis dos compostos 1-3 apresentam bandas no intervalo espectral de 389-365, 650-734 e 1050-1067 nm, que podem ser atribuídas às transições de campo ligante  $^3A_{2g} \rightarrow ^3T_{1g}$  (P),  $^3A_{2g} \rightarrow ^3T_{1g}$  (F) e  $^3A_{2g} \rightarrow ^3T_{2g}$  (F), respectivamente, características de sistemas de Ni(II) aproximadamente octaédricos<sup>5</sup>.

Com base nos resultados de análise elementar e espectroscópicos, sugere-se as seguintes estruturas para os complexos 1-3 (Figura 1).



**Figura 1.** Estruturas propostas para os complexos 1-3

### Conclusões

Este trabalho permitiu a obtenção de três novos complexos pirazólicos de níquel (II) contendo o íon nitrato. De acordo com os dados obtidos, nas estruturas propostas para os complexos, o átomo de Ni(II) deve situar-se em um ambiente octaédrico, cujos sítios equatoriais estão ocupados por ligantes pirazólicos e os axiais por moléculas de  $H_2O$ .

### Agradecimentos

CAPES, CNPq e FAPESP.

<sup>1</sup> Leininger, S.; Olenyuk, B. and Stang, P. J. *Chem. Rev.* **2000**, *100*, 853.

<sup>2</sup> Netto, A. V. G.; Frem, R. C. G.; Mauro, A. E. *Polyhedron* **2005**, *24*, 1086.

<sup>3</sup> Curtis, N. F. and Curtis, Y. M. *Inorg. Chem.* **1965**, *4*, 804.

<sup>4</sup> Geary, W. J. *Coord. Chem. Rev.* **1971**, *7*, 81.

<sup>5</sup> Lever, A. B. P. *Inorganic Electronic Spectroscopy*. Amsterdam: Elsevier, **1968**, 804.