

Síntese, caracterização espectroscópica e estrutural de compostos de adição de $\text{Zn}(\text{NCS})_2$, $\text{Cd}(\text{NCS})_2$ e $\text{Hg}(\text{SCN})_2$ com α -diiminas

Leonardo da Cunha Ferreira(PG)¹, Carlos Alberto Lombardi Filgueiras (PQ)*, Lorenzo do C. Visentin (PQ)¹, Bruno G. Loschiavo de Freitas (IC)¹, Jairo Bordinhão (PQ)¹ e Manfredo Hörner (PQ)²

¹Instituto de Química - Universidade Federal do Rio de Janeiro-UFRJ-CP 68563 – 21945-970 Rio de Janeiro - RJ

²Departamento de Química – Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS.

*e-mail: calf@iq.ufrj.br

Palavras Chave: α -diiminas, estruturas cristalinas, mercúrio, cádmio e zinco

Introdução

Foram sintetizadas as α -diiminas **1** e **2**, mostradas abaixo, e seus adutos com $\text{Zn}(\text{NCS})_2$, $\text{Cd}(\text{NCS})_2$ e $\text{Hg}(\text{SCN})_2$. Ligantes semelhantes¹ já haviam sido utilizados para a síntese de complexos com diferentes aplicações, destacando-se dentre elas, o uso como catalisadores para a polimerização de olefinas². No presente trabalho, mostram-se a síntese e as propriedades estruturais e espectroscópicas dos complexos de $\text{Zn}(\text{NCS})_2$ ($\text{C}_{60}\text{H}_{48}\text{N}_8\text{S}_4\text{Zn}_2$) e $\text{Cd}(\text{NCS})_2$ ($\text{C}_{60}\text{H}_{48}\text{N}_8\text{S}_4\text{Cd}_2$) com **1** e de $\text{Hg}(\text{SCN})_2$ com **1** ($\text{C}_{30}\text{H}_{24}\text{N}_4\text{S}_2\text{Hg}$) e **2** ($\text{C}_{34}\text{H}_{32}\text{N}_4\text{S}_2\text{Hg}$).

Resultados e Discussão

Os ligantes e os complexos foram sintetizados *in situ* em metanol, sob refluxo, com ácido acético como catalisador. Os rendimentos giram em torno de 85%. Os quatro complexos foram caracterizados por CHN e estudados por I.V., ¹HRMN e cristalografia de Raios X.

O esquema abaixo mostra a síntese dos complexos.

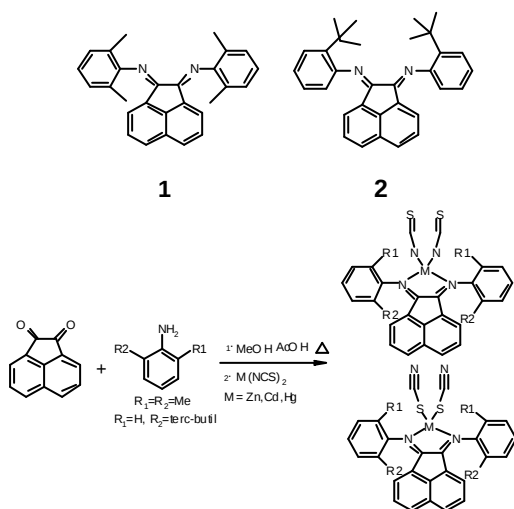


Figura 1: Ligantes preparados (**1** e **2**) e esquema de reações de síntese dos complexos.

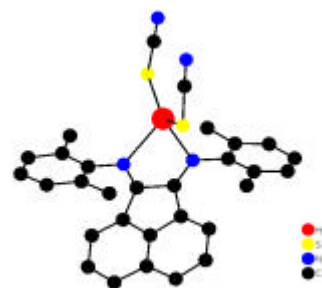


Figura 2: Estrutura molecular do complexo de $\text{Hg}(\text{SCN})_2$ com o ligante **1** ($\text{C}_{30}\text{H}_{24}\text{N}_4\text{S}_2\text{Hg}$).

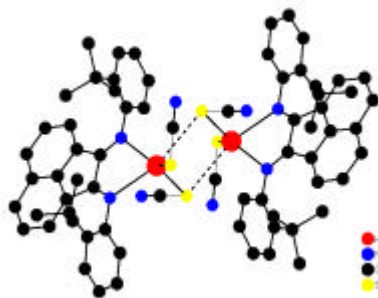


Figura 3: Estrutura molecular do complexo de $\text{Hg}(\text{SCN})_2$ com o ligante **2** ($\text{C}_{34}\text{H}_{32}\text{N}_4\text{S}_2\text{Hg}$).

Conclusões

Com $\text{Zn}(\text{NCS})_2$ e $\text{Cd}(\text{NCS})_2$ só se obtiveram complexos com **1**, os quais são dímeros com uma unidade SCN terminal e a outra em ponte, e o metal no centro de uma bipirâmide trigonal distorcida. Já com $\text{Hg}(\text{SCN})_2$, o complexo com **1** é monomérico e tetraédrico em torno do metal, já com **2** o metal está no centro de um tetraedro altamente distorcido, com interações fracas que levam a um dímero.

Agradecimentos

CNPq, DQI-UFRJ

[1]-Koten, G.V.; Vrieze, K., *Advances in Organometallic Chemistry*, **1980**, 21, 151-233.[2]-Poel, H.V.D.; Koten, G.V. *Synth. Commun.*, **1978**, 8, 305.

[2]-Heinberg, H.; Johansson, Lars.; Gropen, O., *J. Am. Chem. Soc.*, **2000**, 122, 10831- 10845.