

Avaliação da Nuclearidade das Entidades Moleculares de Complexos de Hg(II) e Ag(I) com ligante 1,3-bis(4-iodofenil)triazenido

Bernardo A. Iglesias^{1*}(IC), Paulo R. Martins¹(IC), Fernanda Broch¹(PG), Herton Fenner¹(PQ), Manfredo Hörner¹(PQ).

quimicoufsm@hotmail.com

¹Núcleo de Investigação de Trizenos e Complexos/NiTriCo/Departamento de Química/UFSM/Santa Maria/RS CEP 97110-970.

Palavras Chave: Complexo Triazenido, Difração de Raios-X, Estrutura Cristalina.

Introdução

Os trizenos integram grupo de compostos orgânicos com uma longa história. Griess em 1859 sintetizou o 1,3-bis(fenil)triazeno e derivados como as primeiras moléculas incluindo uma cadeia aberta com três átomos de nitrogênio em sequência¹. Cadeias trizenídicas contendo grupos arilas, como 1,4-substituintes (Ar-N=N-NH-Ar), têm sido intensamente estudados durante as últimas décadas. Cátions metálicos representativos e de transição coordenam-se a ligantes trizenídicos quando estes são substituídos por grupos halogenados, como o iodo, nas posições *para* dos anéis arilas. Reações com acetato de mercúrio (II) e nitrato de prata (I) resultam em complexos mononuclear e binuclear, respectivamente, sendo ambos estáveis envolvendo dois ligantes trizenídicos na esfera de coordenação dos centros metálicos².

Resultados e Discussão

METODOLOGIA

O complexo $[(IC_6H_4N_3C_6H_4)_2Hg]$ (**1**) foi sintetizado através da reação do pré-ligante 1,3-bis(4-iodofenil)triazeno, desprotonado em Acetona/KOH, com acetato de mercúrio (II), previamente solubilizado em MeOH.

O complexo $[(IC_6H_4N_3C_6H_4)_2Ag_2]$ (**2**) foi sintetizado através da reação do pré-ligante 1,3-bis(4-iodofenil)triazeno, desprotonado em THF/KOH com nitrato de prata (I), previamente solubilizado em CH_3CN .

A Figura 1 mostra a representação da fórmula estrutura do pré-ligante utilizado neste estudo.

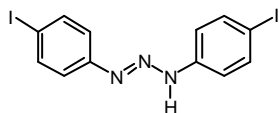


Figura 1. Representação da fórmula estrutural do 1,3-bis(4-iodofenil)triazeno.

Dos complexos (**1**) e (**2**) foram obtidos, monocristais amarelos e laranjas através da lenta evaporação da solução-mãe, respectivamente, adequados para coleta de dados por difração de raios-X.

A figura 2 mostra a projeção destas estruturas cristalinas.

Dados da coleta (Difratômetro Bruker ApexII-CCD) e refinamentos das estruturas:

(**1**): F.M = $C_{24}H_{16}N_6I_4Hg$, $M_r = 1096,62g$, $T = 293(2)K$, Sistema Cristalino *Monoclínico*, Grupo espacial *P-1*, $a = 9,4714(6)Å$, $b = 9,0292(5)Å$, $c = 32,8401(18)Å$, $\beta = 96,586(5)^\circ$, $V = 2789,9(3)Å^3$, $Z = 4$, $R_1 = 0,0397$, $wR_2 = 0,0746$.

(**2**): F.M = $C_{24}H_{16}N_6I_4Ag_2$, $M_r = 1111,74g$, $T = 293(2)K$, Sistema Cristalino *Ortorrômbico*, Grupo Espacial *Cmca*, $a = 31,0344(9)Å$, $b = 6,0301(2)Å$, $c = 14,6869(4)Å$, $a = \beta = \gamma = 90^\circ$, $V = 2748,51(14)Å^3$, $Z = 4$, $R_1 = 0,0230$, $wR_2 = 0,0650$.

A solução da estrutura e o refinamento foram obtidos aplicando-se o programa SHELXS97 e SHELXL97, respectivamente³.



Figura 2 Projeção das estruturas moleculares dos complexos (**1**) e (**2**), respectivamente.

Conclusões

A utilização de um ligante triazenido, estrategicamente substituídos com grupos arilas terminais contendo iodo na posição *para* do anel aromático, demonstra que não ocorrem efeitos estéricos sobre o metal coordenado. Este aspecto aliado à geometria de coordenação linear (preferencial) dos íons Hg(II) e Ag(I) justificam a nuclearidade das moléculas dos complexos.

Agradecimentos

CNPq, CAPES.

¹ Griess, P; Proc. Roy. London, **1859**, 9, 594; Ann. Chim. Paris, **1861**, 117, 1; Ann. Chim. Paris, **1862**, 121, 257.

² Ríos-Moreno, G. et al; *Polyhedron*, **2003**, 22, 563-568.

³Sheldrick, G. M.; *SHELXL-97; Program for Crystal Structure Refinement*, **1997**, University of Göttingen, Germany.