

# 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<sup>1\*</sup>(IC), Paulo R. Martins<sup>1</sup>(IC), Fernanda Broch<sup>1</sup>(PG), Herton Fenner<sup>1</sup>(PQ), Manfredo Hörner<sup>1</sup>(PQ).

[quimicoufsm@hotmail.com](mailto:quimicoufsm@hotmail.com)

<sup>1</sup>Núcleo de Investigação de Triazenos e Complexos/NiTriCo/Departamento de Química/UFSM/Santa Maria/RS CEP 97110-970.

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

## Introdução

Os triazenos 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 sequência<sup>1</sup>. Cadeias triazénidas contendo grupos arilas, como 1,4-substituintes ( $\text{Ar}-\text{N}=\text{N}-\text{N}-\text{NH}-\text{Ar}$ ), têm sido intensamente estudados durante as últimas décadas. Cátions metálicos representativos e de transição coordenam-se a ligantes triazénidos 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 triazénidos na esfera de coordenação dos centros metálicos<sup>2</sup>.

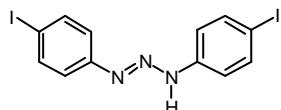
## Resultados e Discussão

### METODOLOGIA

O complexo  $[(\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{I})_2\text{Hg}]$  (**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  $[(\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{I})_2\text{Ag}_2]$  (**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<sub>3</sub>CN.

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<sub>24</sub>H<sub>16</sub>N<sub>6</sub>I<sub>4</sub>Hg, M<sub>r</sub> = 1096,62g, T = 293(2)K, Sistema Cristalino Monoclínico, Grupo espacial P-1,  $a = 9,4714(6)\text{\AA}$ ,  $b = 9,0292(5)\text{\AA}$ ,  $c = 32,8401(18)\text{\AA}$ ,  $\beta = 96,586(5)^\circ$ ,  $V = 2789,9(3)\text{\AA}^3$ ,  $Z = 4$ ,  $R_1 = 0,0397$ ,  $wR_2 = 0,0746$ .

(**2**): F.M = C<sub>24</sub>H<sub>16</sub>N<sub>6</sub>I<sub>4</sub>Ag<sub>2</sub>, M<sub>r</sub> = 1111,74g, T = 293(2)K, Sistema Cristalino Ortorrômbico, Grupo Espacial Cmca,  $a = 31,0344(9)\text{\AA}$ ,  $b = 6,0301(2)\text{\AA}$ ,  $c = 14,6869(4)\text{\AA}$ ,  $a = \beta = ? = 90^\circ$ ,  $V = 2748,51(14)\text{\AA}^3$ ,  $Z = 4$ ,  $R_1 = 0,0230$ ,  $wR_2 = 0,0650$ .

A solução da estrutura e o refinamento foram obtidos aplicando-se o programa SHELXS97 e SHELXL97, respectivamente<sup>3</sup>.



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

## Conclusões

A utilização de um ligante triazeno, 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.

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

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

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

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