

Avaliação das Ligações de Hidrogênio no complexo *cis*-Bis[3-(2-fluorofenil)-1-(4-etoxicarbonilfenil)triazenido]-bis(piridina)níquel(II)

Fernanda Broch^{1*}(PG), Bernardo A. Iglesias¹(IC), Paulo César Mendes Villis¹(PG), Herton Fenner¹(PQ),
Manfredo Hörner¹(PQ)

fernandabroch@mail.ufsm.br

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

Palavras Chave: trizenos, difração de raios-X, níquel (II), ligações de hidrogênio.

Introdução

O ritmo da elucidação de complexos metálicos envolvendo ligantes triazenidos vem crescendo nas últimas décadas. Neste estudo utilizamos a difração de raios-X em monocristal como recurso para responder as questões específicas vinculadas à estrutura cristalina e molecular do complexo *cis*-Bis[3-(2-fluorofenil)-1-(4-etoxicarbonilfenil)triazenido] - bis(piridina)níquel(II) (**1**) avaliando a presença de ligações de hidrogênio. Estas são importantes ligações secundárias, viabilizando a auto-organização molecular levando a formação de arranjos supramoleculares no estado sólido.

Resultados e Discussão

O complexo triazenido (**1**) foi sintetizado através da reação do pré-ligante 3-(2-fluorofenil)-1-(4-etoxicarbonilfenil)triazeno, desprotonado em MeOH/KOH, com cloreto de níquel(II), previamente solubilizado em MeOH na proporção de (2:1). A Figura 1 mostra a representação da fórmula estrutural do pré-ligante utilizado neste estudo.

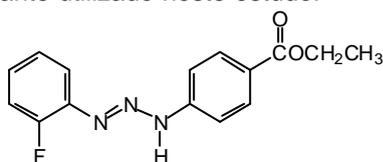


Figura 1. Representação da fórmula estrutural do 3-(2-fluorofenil)-1-(4-carboxifenil)triazeno.

Do complexo (**1**) foi obtido monocristal apto à coleta de dados por difração de raios-X. A geometria de coordenação do íon Ni(II) é rômbrica distorcida, com dois íons triazenidos, agindo como ligantes bidentados. Duas moléculas neutras de piridina em posição *cis* completam a esfera de coordenação do íon metálico. A coleta dos dados (difratômetro Bruker ApexII-ccd) e refinamentos da estrutura reúne os seguintes parâmetros para (**1**): F.M. = C₄₀H₃₆N₈O₄F₂Ni, T=293(2)K, Sistema cristalino *Ortorrômbrico*, Grupo espacial *Pccn*, a=11,1354(6)Å, b=15,5750(10)Å, c=22,7154(13)Å, α=β=γ=90°, V=3939,62(4)Å³, F(000)=1639,6, Z = 4, R₁ = 0,067,

wR₂ = 0,140. Na Figura 2 encontra-se a projeção da estrutura molecular do complexo (**1**).

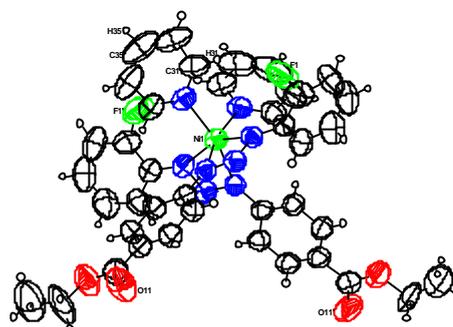


Figura 2. Projeção da estrutura molecular do complexo (**1**).

Destaca-se que a estrutura do composto apresenta interações intramoleculares entre C31–H31...F1 [C31...F1 = 3,317(5) e C31–H31...F1 = 145°]. Além das ligações de hidrogênio intramoleculares, a estrutura cristalina do complexo (**1**) apresenta ligações intermoleculares C35–H35...O11' [C35...O11' = 3,297(8) e C35–H35...O11' = 166°]; código de simetria: ('): -1/2-x, y, 1/2+z, que formam cadeias moleculares bidimensionais orientadas nas direções cristalográficas [001] e [100].

Conclusões

O íon metálico Ni(II) coordenado pelos ânions ligantes 3-(2-fluorofenil)-1-(4-etoxicarbonilfenil) triazenido é inédito. A utilização deste ligante, estrategicamente substituído nos grupos 4-etoxicarbonilfenilas terminais, foi usado para verificar a ocorrência de interações, intramoleculares e intermoleculares, mostrando que a presença de ligações de hidrogênio é responsável pela auto-associação formando cadeias supramoleculares bidimensionais no estado sólido. O comportamento observado para a coordenação do íon Ni(II) encontra-se condizente com dados encontrados na literatura.¹

Agradecimentos

CNPq, CAPES.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

¹Giglio, Vinícius F.; Dissertação de Mestrado, Santa Maria – UFSM –RS, **2006**.