

Síntese e caracterização estrutural de um complexo de cobre(I) com fenilacetona nitrila – [Cu(BzCN)₄][BF₄].

Viviane A. da S. Falcomer (PG)¹, Sebastião S. Lemos* (PQ)¹, Guilherme B. C. Martins (IC)¹, Gleison A. Casagrande (PG)², Robert A. Burrow (PQ)², Ernesto S. Lang (PQ)²
 sslomos@unb.br

1. LAQIP - Instituto de Química – Universidade de Brasília, Brasília - DF.

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

Palavras Chave: cobre(I), fenilacetona nitrila, estrutura cristalina molecular

Introdução

O cátion [Cu(MeCN)₄]⁺ tem sido freqüentemente usado como material de partida para síntese de novos complexos de cobre(I). Apresentamos a síntese e caracterização estrutural do análogo a este cátion substituindo a acetonitrila pela fenilacetona nitrila (BzCN). O composto [Cu(BzCN)₄][BF₄] foi caracterizado por espectroscopia de infravermelho, RMN multinuclear, microanálises (C,H,Cu,N) e difração de raios X em monocristal. A estrutura cristalina do composto revela uma geometria tetraédrica ligeiramente distorcida ao redor do átomo de cobre(I).

Resultados e Discussão

O complexo [Cu(BzCN)₄][BF₄] foi preparado em analogia ao [Cu(MeCN)₄][BF₄], de acordo com a literatura,¹ utilizando-se a respectiva nitrila, BzCN, como ligante e solvente, de acordo com a equação química:



O produto [Cu(BzCN)₄][BF₄] é um sólido incolor, estável, as propriedades físico-químicas, espectroscopia de RMN multinuclear e microanálise do composto já foram apresentados anteriormente.² O composto [Cu(BzCN)₄][BF₄] cristaliza no sistema monoclinico, P2(1)/n, a = 9,9620; b = 29,881; c = 10,2236 (Å); Z = 4; R₁ = 0,0367; wR₂ = 0,096 [I > 2σ (I)]. A estrutura cristalina do composto revela que o átomo de cobre está coordenado a quatro moléculas do ligante em uma geometria tetraédrica distorcida. Alguns comprimentos (Å) e ângulos (°) de ligação selecionados para o composto [Cu(BzCN)₄][BF₄] são: Cu(1)–N(1), 1,9828(12); Cu(1)–N(2), 1,9869(12); Cu(1)–N(3), 1,9815(12); Cu(1)–N(4), 1,9838(12); N(3)–Cu(1)–N(1), 102,14(5); N(3)–Cu(1)–N(4), 114,74(5); N(1)–Cu(1)–N(4), 111,90(5); N(3)–Cu(1)–N(2), 110,78(5); N(1)–Cu(1)–N(2), 114,89(5); N(4)–Cu(1)–N(2), 102,85(5); C(11)–N(1)–Cu(1), 170,74(12); C(21)–N(2)–Cu(1), 170,72(12);

C(31)–N(3)–Cu(1), 169,69(12); C(41)–N(4)–Cu(1), 168,37(12). A variação da envergadura do ângulo N–Cu–N é de 102 a 118° e tornando a ligação Cu–N–C não linear envergando-se aproximadamente 12°. O ânion BF₄⁻ interage com o complexo através de ligações de hidrogênio.

O composto foi utilizado como material de partida em reação com 4,6-dimetilpirimidina-2-tiona (dmpymtH) obtendo-se o composto conhecido [Cu(dmpymtH)₃][BF₄].³

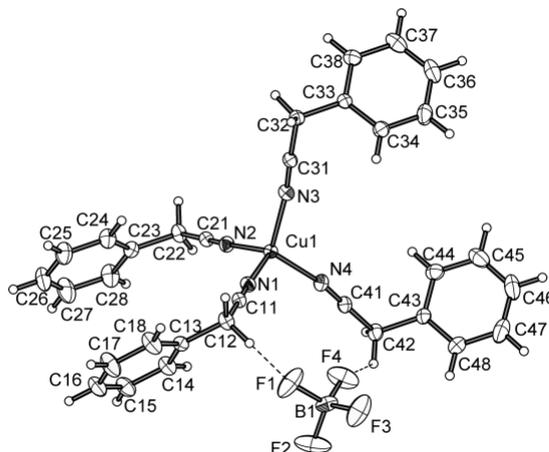


Figura 1. Estrutura cristalina molecular do [Cu(BzCN)₄][BF₄].

Conclusões

No complexo [Cu(BzCN)₄][BF₄] o átomo de cobre está ligado a quatro moléculas de fenilacetona nitrila, resultando em uma geometria tetraédrica ligeiramente distorcida.

Agradecimentos

Agradecemos à FINEP (Projeto FINEP-CT INFRA 0970/01).

¹ G.J. Kubas, B. Monzyk, A. L. Crumbliss, in R. J. Angelici (Ed.), *Inorg. Synth* **1991**, 28, 68.

² V. A. S. Falcomer, S. S. Lemos *27^ª RASBQ*, **2004**

³ V.A.S. Falcomer, S.S. Lemos, A.A. Batista, J. Ellena, E.E. Castellano, *Inorg. Chim. Acta* **2006**, 359, 1064.