

Síntese e Estrutura Cristalina de Complexos de Mercúrio com o Ligante 1,2-Bis-(2-etilfenilimino)-acenafteno.

Raquel Berco Machado¹ (IC), Leonardo da C. Ferreira^{*1} (PG), Jairo Bordinhão¹ (PQ), Carlos Alberto L. Filgueiras¹ (PQ), Roberto de S. Martins¹ (PG), Lorenzo do Canto Visentin¹ (PQ), Manfredo Hörner² (PQ). mravel4@yahoo.com.br

¹Instituto de Química – Universidade federal do Rio de Janeiro

Avenida Athos da Silveira Ramos, 149, Cidade Universitária - Ilha do Fundão, CEP 21941-909 Rio de Janeiro – RJ.

²Departamento de Química – Universidade Federal de Santa Maria

Palavras Chave: *Estrutura cristalina, α -diiminas, mercúrio(II).*

Introdução

Complexos envolvendo o grupamento $R^1N=C(R^2)-C(R^3)=NR$ têm sido largamente utilizados como catalisadores do tipo Brookhart¹ em reações de polimerização de olefinas. Neste trabalho, descrevemos a síntese e caracterização de dois novos complexos envolvendo o 1,2-Bis-(2-etilfenilimino)-acenafteno e o íon Hg(II) como centro metálico estratégico.

Resultados e Discussão

A síntese de ambos os complexos, (1) e (2) envolve a reação de condensação *in situ* dos precursores acenaftenoquinona e 2-etilfenilamina com os respectivos sais metálicos HgCl₂ (1) e Hg(SCN)₂ (2) tendo metanol como solvente (reações *template*). Cristais adequados para difração de raios X foram obtidos no próprio meio de reação após lenta evaporação do solvente.

A estrutura cristalina² do complexo (1) mostra o íon Hg(II) coordenado de modo tetraédrico com o ligante nitrogenado atuando como quelato. Dois cloretos completam a esfera de coordenação em torno do centro metálico, Figura 1a.

De modo similar, o complexo (2) apresenta o centro metálico Hg(II) com NC = 4 com o ligante α -diimínico também coordenado de forma quelante e duas espécies SCN⁻ atuando como co-ligantes, Figura 1b.

A tabela 1 reúne alguns dados da análise por difração de raios x para os complexos (1) e (2).

Tabela 1. Dados cristalográficos para (1) e (2).

Fórmula	C ₂₈ H ₂₄ N ₂ HgCl	C ₃₀ H ₂₄ N ₄ HgS
Sistema Cristalino/ Grupo Espacial	Monoclínico/ P2 ₁ /n	Monoclínico/ P2 ₁ /n
a (Å)	11.1742(2)	9.1154(18)
b (Å)	19.9955(4)	17.888(4)
c (Å)	11.6592(2)	17.637(4)
Dados/constr/par.	4754 / 0 / 300	2572 / 0 / 334
Goodness-of-fit	1.024	1.067
Índices R finais [>2 σ (I)]	R ₁ = 0.0306, wR ₂ = 0.0622	R ₁ = 0.0164, wR ₂ = 0.0363

Densidade eletr.	0.550 e ⁻	0.314 e ⁻
Residual (Å ⁻³)	0.550 e ⁻	0.230 e ⁻

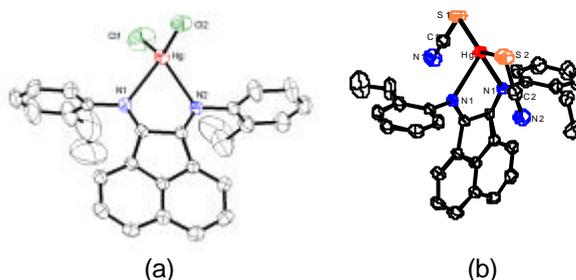


Figura 1: (a) representação ORTEP para a estrutura do complexo (1), (b) para o complexo 2.

Os comprimentos de ligações observados nos dois complexos estão de acordo com valores descritos na literatura para compostos envolvendo ligantes similares³.

Quando se levam em conta as interações intermoleculares, observa-se que, no estado sólido, ambos os complexos formam estruturas poliméricas estendidas resultantes de ligações de hidrogênio entre os co-ligantes Cl⁻ (1) e SCN⁻ (2) e átomos de hidrogênio de moléculas vizinhas.

Conclusões

Ambos os complexos são inéditos e encontram-se bem caracterizados por difração de raios X, análise elemental, RMN ¹H e IV. As estruturas obtidas revelam o potencial dos ligantes α -diimínicos deste tipo em formar novos complexos quando associados a centros metálicos de interesse e co-ligantes específicos. Pode-se concluir também que, através da reação *template*, o centro metálico molda o ligante diimínico, ligante este de difícil obtenção.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq e CAPES.

¹ Rix, F. C. & Brookhart, M. 1995. *J. Am. Chem. Soc.* 117, 1137–1138.

² Sheldrick, G. M., **1997**, SHELXS97 and SHELXL97. University of Göttingen, Germany.

³ Allen, F. H., Kennard, O., Watson, D. G., Brammer, L. L., Orpen, A. G. & Taylor, R. **1987**, *J.Chem. Soc. Perkin Trans. 2*, pp. S1-19