Síntese e Estrutura Cristalina de um Complexo Binuclear com o fragmento $[Cu(II)OCH_3]_2^{2+}$ e o Ligante *(E)*-3-(2-clorofenil)-1-(2-nitrofenil)triazeno.

Juliana de O. Fank[1] (PG)*, Vinícius F. Giglio[1] (PG), Mariana Boneberger Behm[1] (PG) Manfredo Hörner[1] (PQ). *julianafank@ibest.com.br

[1] *Núcleo de Investigação de Triazenos e Complexos – NITriCo, Departamento de Química, UFSM, Santa Maria – RS, CEP 97.110-970 (www.ufsm.br/nitrico)*

Palavras Chave: *triazeno, complexo binuclear de Cu(II), difração de raios-X em monocristal .*

Introdução

Triazenos podem ser classificados como sistemas mono ou multicatenados abertos, caracterizados por três átomos de nitrogênio unidos sequencialmente em uma cadeia diazoamínica[1]. Quando desprotonados desperta interesses na química de coordenação, pois apresentam pares de e létrons livres, os quais podem coordenar com íons metálicos, preferencialmente do bloco *d*, conferindo-lhes diferentes geometrias de coordenação. O objetivo deste trabalho foi avaliar a nuclearidade de um complexo triazenido de Cu(II) na presença de íons metóxido no meio de reação, bem como, a geometria de coordenação do centro metálico em função da presença de um sítio coordenante na posição *orto* de um grupo arila terminal na cadeia triazenídica.

Resultados e Discussão

Para a síntese do complexo dissolveu-se o ligante (*E*)-3-(2-clorofenil)-1-(2-nitrofenil)triazeno em metanol seguido de desprotonação com solução alcalina de metóxido de potássio. Posteriormente adicionou-se $Cu(OAc)_2.H_2O$ dissolvido em metanol, e após cinco minutos de agitação magnética foi adicionado piridina. Com base na análise de difração de raios-X (difratômetro Bruker Apexll-ccd) em monocristal verificou-se que: o complexo pertence ao sistema cristalino monoclínco, grupo espacial $P2_1/n$, índices de discordância para todas as reflexões são $\boldsymbol{R}_1$ = 0.0671, $\boldsymbol{wR}_2$ = 0.1749, parâmetros de cela ***a*** = 11.4269(7), ***b*** = 15.2518(9), ***c*** = 11.5706(7)Å, *b* = 100.415(4)°.

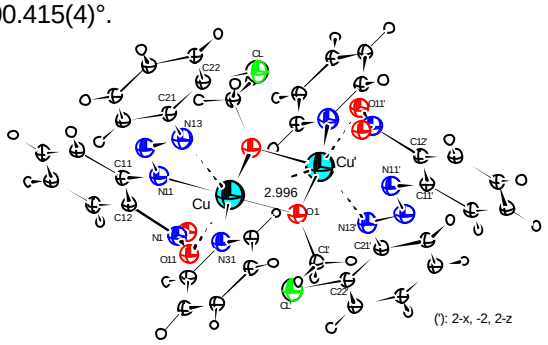

Figura 1. Estrutura do Complexo **(1)**.

O complexo **(1)** apresenta o íon binuclear, onde cada Cu(II) coordenado a um ligante triazenído, uma piridina e dois íons metóxido, estes últimos aproximando os dois íons cobre(II) em ponte. A geometria do íon Cu(II) é quadrática planar, sendo expandida para octaédrica distorcida através de ligações polarizadas descritas na Tabela 1.

Tabela 1: Comprimento de ligação (Å)* selecionados para o complexo 1.

	Ligações Formais				Ligações Polarizadas	
Cu	N11	N31	O1	O1'*	N13	O11
	1,983(4)	1,999(4)	1,930(3)	1,913(1)	2,645(5)	2,554(1)

'* Código de simetria (1): 2-*x*, -*y*, 2-*z*.

A ligação secundária polarizada entre Cu···O ocorre devido a escolha estratégica de um ligante aril triazenido substituído em *orto* no anel fenila por um grupo nitro, onde esta interação não é observada quando o grupo nitro está em posição *meta* ou *para*. Os grupos metóxi também favorecem a interação intermetálica Cu···Cu' = 2,99(11)Å. É provável que esta interação intermetálica envolva um acoplamento antiferromagnético entre os íons Cu(II).

Conclusões

A geometria de coordenação passa de quadrática plana para octaédrica distorcida devido interações secundárias Cu···O provocada pelo átomo de oxigênio do grupo nitro substituído na posição *orto* do anel arila terminal. A binuclearidade é favorecida pela presença dos íons metóxido (CH_3O^-) atuando em ponte entre os dois íons cobre(II).

Agradecimentos

CAPES, CNPq

[1] Moore,D.S.;Roson,S.D; *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.*; **1986,** *30*, 1-68.
[2] Bresolin, L.; *Tese de Doutorado*, **2003.**