

Síntese e estrutura cristalina do Bis{1,4-bis(2-fluorofeniltriazenido)butano-cobre(II)} (2)

Fernanda Broch^{1,2*}(PG), Gustavo Luiz Paraginski²(PG), Claiton Roberto Berticelli²(PG), Aline Locatelli¹(PG), e Manfredo Hörner²(PQ) *fernandabroch@hotmail.com

¹Instituto Federal de Santa Catarina (IF-SC), Campus São Miguel do Oeste. Rua 22 de Abril, s/nº, Bairro São Luiz. São Miguel do Oeste-SC. CEP: 89900-000

²Núcleo de Investigação de Triazenos e Complexos – NITriCo, Departamento de Química, UFSM, Cx. Postal 5071, 97.110-900, Santa Maria-RS, (www.ufsm.br/nitrico)

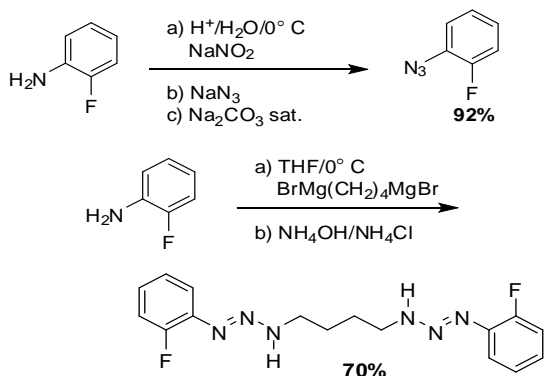
Palavras Chave: bistriazenos, supramolecularidade, interação intermetálica Cu...Cu

Introdução

Uma abordagem em relação à síntese de complexos que exibem novas propriedades físicas e químicas é o design de ligantes que podem ser facilmente funcionalizados a fim de modificar a esfera de coordenação do metal. Uma classe de ligantes que atraem a atenção são os 1,n-Bis(feniltriazenido)alcanos, $C_5H_5N(H)N=N(CH_2)_nN=NN(H)C_6H_5$, uma vez que os arranjos supramoleculares no estado sólido podem ser arquitetados estrategicamente, impondo-se a auto-organização de unidades moleculares primárias, através de ligações secundárias. A investigação deste trabalho concentrou-se na síntese de um ligante triazeno biscatenado incluindo um fragmento central flexível, o butano, e a partir deste a síntese e caracterização de um complexo binuclear de cobre sugerindo interações intermetálicas (M...M).

Resultados e Discussão

A preparação da azida e a síntese do ligante 1,4-bis(2-fluorofeniltriazenido)butano (1) baseou-se em dados da literatura.^{1,2} O ligante foi obtido a partir da reação do reagente de Grignard 1,4-bis(bromomagnésio)butano com fluorofenilazida a 0 °C em THF seco (**Esquema1**). O complexo (2) foi preparado a partir do ligante desprotonado com acetato de cobre (II) em uma mistura de THF/MeOH/Py levando a formação de monocristais aptos a difração de raios-X.



Esquema 1: Síntese do 1,4-bis(2-fluorofeniltriazenido)butano

O composto cristaliza no sistema cristalino triclinico, grupo espacial $P-1$ e os índices de discordância para $[I > 2\sigma(I)]$ são $R_1=0.0317$ e $wR_2=0.0862$. A distância Cu...Cu é de 2.4738(4) Å, sendo mais curta que no $\{Cu(CH_3COO)_2 \cdot H_2O\}$ (2.65Å). O complexo (2) apresenta ligações de hidrogênio C-H...F $\{(C1 \cdots F(2))=2,973(3) \text{ \AA}; C1-H(1B) \cdots F(2)=114^\circ\}$ e $\{(C2 \cdots F(1))=3,354 \text{ \AA}; C2-H(2B) \cdots F(1)=162^\circ\}$ formando um arranjo supramolecular na direção cristalográfica $[1 \ -1 \ 0]$ (**Figura 1**).

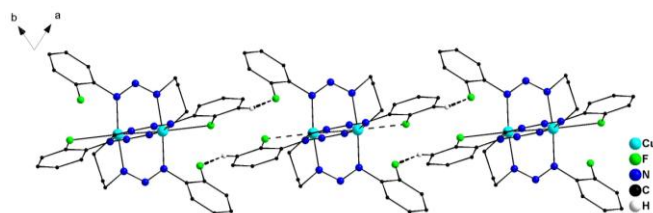


Fig. 1: Projeção³ do arranjo supramolecular 1-D na direção cristalográfica $[1 \ -1 \ 0]$ ao longo do plano cristalográfico ab . Átomos de hidrogênio omitidos para melhor visualização da estrutura. [Código de simetria (\prime) $1-x, -y, 1-z$].

Conclusões

A caracterização estrutural do complexo mostra curta distância de interação intermetálica, podendo o composto apresentar potenciais e interessantes propriedades magnéticas e biológicas. Autoassocia-se via ligações de hidrogênio formando um arranjo supramolecular unidimensional evidenciando a relevância das interações secundárias não-covalentes para a promoção da auto-organização molecular no estado sólido.

Agradecimentos

Ao CNPq pelo apoio financeiro. Ao IFSC pelo incentivo à qualificação docente.

¹ Shil, F.; Waldo, J. P.; Chen, Y.; Larock, R. C. *Org. Letters*, 10(12), 2409-2412, 2008.

² CAPORUSSO, A. M.; ARONICA, L. A.; R.; GORI, M. *Journal of Organometallic Chemistry*, v. 648, p. 109-118, 2002

³ BRANDENBURG, K. *DIAMOND*. 2004-2005, Version 3.1. Crystal Impact GbR, Bonn, Germany.