

ESTRUTURA CRISTALINA/MOLECULAR DO COMPLEXO 5-BROMOSALICÍALDEÍDOTIOSSEMICARBAZONATO PIRIDINA DE NÍQUEL (II)

Fernanda Rosi S. Pederzoli¹ (PG)*, Jean Lucas de O. Arias¹ (IC), Leandro Bresolin¹ (PQ), Adriano B. de Oliveira² (PQ), Johannes Beck³ (PQ), Vanessa S. Carratu¹ (PQ)

fequimica2005@yahoo.com.br.

(1) Escola de Química e Alimentos, (FURG), RioGrande-RS

(2) Universidade Federal de Sergipe, (UFS), São Cristóvão-SE

(3) Universidade de Bonn (Uni-Bonn), Bonn-Alemanha

Palavras Chave: complexo de níquel II

Introdução

As tiossemicarnazonas derivadas de salicilaldeídos são ligantes versáteis, pois possuem na sua estrutura átomos de nitrogênio, oxigênio e enxofre que doam pares eletrônicos aos íons metálicos e são capazes de estabilizar complexos onde os centros metálicos apresentam elevados estados de oxidação. A desprotonação do oxigênio fenólico e do nitrogênio imínico faz com que o ligante fique dianiônico formando anéis pentagonais e hexagonais estabilizados por ressonância^[1,2].

O objetivo deste trabalho é apresentar a estrutura cristalina/molecular do complexo 5-bromosalicilaldeí-dotiossemicarbazonato piridina de níquel (II), ([Ni(5Br-SalTSC)py]), por difração de raios-X de monocristal.

Resultados e Discussão

O [Ni(5Br-SalTSC)py] foi obtido a partir de uma reação equimolar da tiossemicarbazona com acetato níquel (II) tetra hidratado em THF e piridina. A reação mantida em refluxo durante 4h e posteriormente foram adicionados N,N-dimetilformamida e tolueno. Cristais castanho-avermelhados adequados para análise foram obtidos pela evaporação do solvente. O complexo tem ponto de fusão entre 259-262°C e foi obtido com rendimento de 35%.

As principais bandas do espectro de infravermelho para o complexo são (4500-400cm⁻¹): $\nu(\text{N-H})$ 3418-3269, $\nu(\text{C=N})$ 1597, $\nu(\text{C-O})$ 1308, $\nu(\text{N-N})$ 1072 e $\delta(\text{C-S})$ 808. No espectro de UV-Vis foram obtidas as seguintes informações: (800-200 nm) ($\epsilon = \text{dm}^3 \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$), anel aromático 247 ($\epsilon = 16000$), TCLM 274-296 (ombro) e 416 ($\epsilon = 4225$) e S \rightarrow Ni 377 ($\epsilon = 3840$).

O complexo [Ni(5Br-SalTSC)py] cristalizou no sistema monoclinico, grupo espacial P2₁/c, onde a célula elementar apresenta Z igual a 4 e a=12,2448(4)Å, b= 4,11340(10)Å e c= 31,1340(11)Å e $\alpha = \gamma = 90^\circ$ e $\beta = 112,470(10)^\circ$ e os índices de discordância para I>2 σ (I) R₁=0,0232 e

wR₂=0,0507 e para índice de discordância R₁=0,0336 e wR₂=0,0555.

No complexo [Ni(5Br-SalTSC)py] (Figura 1), o centro metálico apresenta número de oxidação igual a +2, NC= 4 e geometria quadrado planar levemente distorcida. Ângulos selecionados: N(1)-Ni-N(4) 177,05(8)° e O-Ni-S 176,49(5)°.

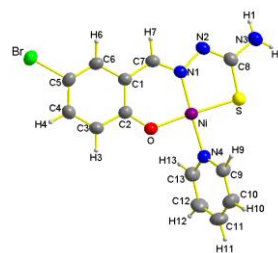


Figura 1. Representação da estrutura cristalina/molecular do complexo [Ni(5Br-SalTSC)py] com elipsóides térmicas com 50% de probabilidade.

O ligante 5-bromosalicilaldeídotiossemicarbazona apresenta-se na dianiônica e como ONS-doador. A esfera de coordenação do metal é completada por uma molécula de piridina, que atua como ligante. As ligações entre o íon níquel e os átomos doadores dos ligantes tiossemicarbazona e piridina possuem os seguintes comprimentos de ligação Ni-O (1,8568(15)Å), Ni-N(2) (1,8574(16)Å), Ni-S 2,1519(6)Å e Ni-N(4) (1,9477(17)Å).

Conclusões

A análise de difração de raios-X em monocristal confirma a obtenção do complexo ([Ni(5Br-SalTSC)py]). Observa-se que o ligante em questão apresenta um grande potencial possibilitando assim, a realização de estudos com outros metais do bloco d.

Agradecimentos

F.R.S.P agradece a CAPES/REUNI pela bolsa concedida e a FAPERGS e a Uni-Bonn .

¹Chatterjee, M., Ghosh, S., *Transition Met. Chem.*, 1998, 23,355-356.

²Güveli, S.; Bal-Dermici, T.; Özdemir, N.; Ülküseven, B., *Transition Met. Chem.*, 2009, 383-388.