

Síntese e estrutura cristalina de novos complexos de Hg(II) com ligantes α -diiminas e triazenos.

Leonardo da C. Ferreira¹(PG), Lorenzo do C. Visentin^{1,2*}(PQ), Manfredo Hörner³(PQ), Carlos A. L. Filgueiras^{1,4}(PQ). lorenzo.visentin@nanobusiness.com.br

¹Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Rio de Janeiro, RJ- Brasil;

²P&D NanoBusiness e-Diffraction Pharma, Rua Marquês de São Vicente, 225, Gávea, 22451-900, Rio de Janeiro, RJ-Brasil. Tel.: +55 21 3527-1242 FAX: +55 21 3527-1236;

³Universidade Federal de Santa Maria, Departamento de Química, Santa Maria, RS- Brasil;

⁴Universidade Federal Minas Gerais, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de química, Belo Horizonte, MG, Brasil.

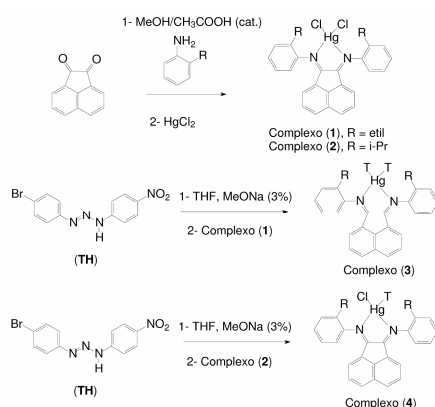
Palavras Chave: diiminas, triazenos, mercúrio, estrutura cristalina.

Introdução

O interesse no estudo de complexos contendo moléculas de α -diiminas e triazenos tem sua origem na síntese e aplicação de complexos contendo α -diiminas como catalisadores na polimerização de olefinas. Por sua vez, moléculas de triazenos podem ser labilizadas durante o processo de polimerização. As α -diiminas de partida foram preparadas através da técnica "one pot"¹, obtendo-se complexos de maneira simples e rápida, com bons rendimentos químicos. Neste trabalho foram planejados, sintetizados e caracterizados 4 complexos de Hg(II) e uma α -diimina livre. Este trabalho é pioneiro, pela primeira vez um triazeno e uma α -diimina fazem parte, simultaneamente, de uma mesma esfera de coordenação.

Resultados e Discussão

Abaixo encontram-se as rotas sintéticas para obtenção dos complexos.



Neste trabalho foram obtidas as estruturas cristalinas de **L1** (α -diimina livre com R=*i*-Pr), complexo (1), (3) e (4). Na **Figura 1** estão apresentados os ORTEP dos complexos (3) e (4). Os parâmetros geométricos das ligações estão de acordo com a literatura.^{2,3} Todos os complexos foram caracterizados por i.v, CHN e ponto de fusão. Os complexos (3) e (4) apresentam um efeito de desordem posicional no grupo NO₂.

p.f.(°C) (3) 234-235;(4) 258-259. (CHN): (3) Calc. C 50,1; H 3,21; N 11,23. Obs. C 50,08; H 3,32; N 11,15. (4) Calc. C 52,06; H 3,30; N 8,68. Obs. C 52,89; H 3,77; N 9,04. i.v (cm⁻¹): (3) ν (CN+CC) 1628-1589, ν (NNN) 1320, (4) ν (CN+CC) 1626-1596, ν (NNN) 1323. Rend.: (3) 59% e (4) 49%.

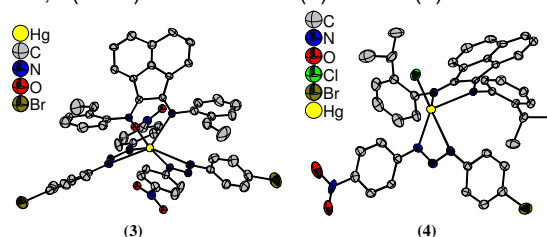


Figura 1. Projeção ORTEP dos complexos (3) e (4). Elipsóides térmicas em um nível de 20%.

Tabela 1. Dados da coleta de intensidades e do refinamento das estruturas cristalina/molecular de (3) e (4).

Complexo	(3)	(4)
Fórmula	C ₅₂ H ₄₀ N ₁₀ O ₄ Br ₂ Hg.2H ₂ O	C ₄₂ H ₃₆ N ₆ O ₂ BrClHg
Sistema	Monoclínico	Monoclínico
Grupo Espacial	C2	P2 ₁ /n
[>2sigma(I)]	R1 = 0,0609	R1 = 0,0515

Conclusões

De modo geral, os rendimentos obtidos neste trabalho foram satisfatórios. Na síntese dos complexos (3) e (4), a influência dos substituintes nos complexos (1) e (2) dita o número de moléculas de triazenos presentes na esfera de coordenação.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, FAPEMIG e à CAPES, assim como ao laboratório de Difração de Raios-X da UFF.

¹ Ferreira, L. C.; Filgueiras, C. A. L.; Visentin, L. C.; Bordinhão, J.; Hörner, M.; *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2008**, *634*, 1896-1900.

² Allen F. H.; Watson, D. G.; Brammer, L.; Orpen, A. G.; and Taylor, R.; *International Tables for Crystallography*. **2006**. Vol. C, ch. 9.5, pp. 790-811.

³ Hörner, M.; Oliveira, G. M.; Visentin, L.C.; Cezar, R.; *Inorg. Chim. Acta*, **2006**, *359*, 4667-4671.