

Síntese, Estrutura Cristalina e Arranjo Supramolecular do Triazenido Complexo de Prata (I) *via* ligações de hidrogênio

Roberta C. B. Scaravelli¹ (IC)*, Aline Locatelli¹ (PG), , Manfredo Horner¹ (PQ).
betascaravelli@gmail.com

¹Núcleo de Investigação de Trizenos e Complexos – NITriCo, Departamento de Química, UFSM, Cx. Postal 5071,97.110-900, Santa Maria-RS, (www.ufsm.br/nitrico).

Palavras Chave: monocristal, supramolecularidade, difração de raios-x, triazenido complexo Ag(I), ligações de hidrogênio aromáticas.

Introdução

Os trizenos são compostos caracterizados por possuírem uma cadeia nitrogenada alifática contendo três átomos de nitrogênio em sequência, conhecidos como grupo diazoamínico ou triazenídico¹ e que contêm grupamentos arilas ligados aos nitrogênios terminais.

Neste trabalho será apresentada a síntese e a estrutura cristalina do complexo [Ag(C₆H₄FNNNC₆H₄NO₂)(P(C₆H₅)₃)] (**1**). Também será avaliada a supramolecularidade do complexo *via* ligações de hidrogênio não-clássicas e o arranjo dimensional dos mesmos utilizando o método de difração de raios-X em monocristal. Essa característica supramolecular se torna importante devido às interações que elas permitem fazer com o DNA sendo, assim, importante na química medicinal.

Resultados e Discussão

O complexo (**1**) foi obtido pela desprotonação do pró-ligante 1-(2-fluorfenil)-3-(2-nitrofenil)triazeno com solução alcóolica de sódio metálico (Na⁺/MeOH) e adição de AgNO₃ solubilizado em acetonitrila, observando-se a formação de precipitado castanho claro. A esta solução com precipitado foi adicionado trifetilfosfina dissolvida em MeOH, na proporção 1:1. O precipitado foi filtrado e a ele adicionado gotas de dimetilsulfóxido. Do complexo (**1**) foram obtidos monocristais vermelhos aptos à coleta de dados por difração de raios-X. A coleta dos dados (difratômetro Bruker ApexII-ccd) e refinamentos da estrutura reúne os seguintes parâmetros para (**1**): F.M: C₃₀H₂₃AgFPN₄O₂, T=293K, sistema cristalino monoclinico, grupo espacial *P2₁/n* com índices de discordância para todas as reflexões de *R*₁ = 0,1763 e *wR*₂ = 0,0882. A **Figura 1** mostra a representação estrutural do complexo (**1**) no qual a geometria de coordenação do íon central é trigonal planar distorcida em função dos ângulos próximos a 120°, provavelmente devido à coordenação em ponte do triazenido ligante.

As moléculas do complexo (**1**) associam-se primeiramente na forma de dímeros centrossimétricos (**Figura 1**) através de ligações de hidrogênio não-clássicas centrossimétricas O(2)···H(44')-C(44') [O2···C(44') = 3,2300(1) Å; O(2)···H(44')-C(44') = 132,20°] [código de simetria ('): -x, 1-y, 2-z].

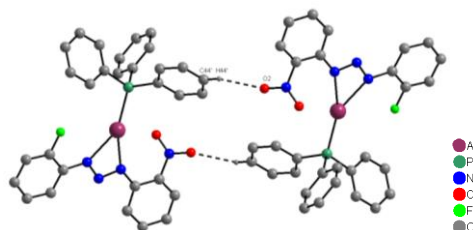


Figura 1. Projeção² dos dímeros centrossimétricos do complexo (**1**). [Código de simetria ('): -x, 1-y, 2-z].

Esses dímeros centrossimétricos associam-se na forma de um arranjo supramolecular 1-D *via* ligações de hidrogênio aromáticas centrossimétricas do tipo C-H···Ph [C(13)-H(13)···M''] onde M = ponto centróide do anel fenila C(51)-C(56) [d_M-H(13) = 2,999 Å; C(13)-H(13)···M'' = 138,235(4)°] [código de simetria ("): 1-x, -y, 2-z] ao longo da direção cristalográfica [1-10], conforme mostra a **Figura 2**.

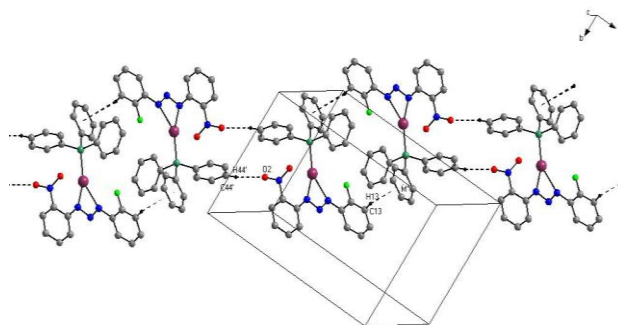


Figura 2: Projeção² do arranjo supramolecular 1-D do complexo (**1**) ao longo da direção cristalográfica [1-10] em função das interações intermoleculares centrossimétricas O2···C44'-H44' (dímeros) e C13-H13···M'', na direção inclinada do eixo cristalográfico c. [Códigos de simetria: (') 1-x, 1-y, 2-z; (") 1-x, -y, 2-z].

Conclusões

O complexo (**1**) apresentou supramolecularidade devido às ligações de hidrogênio não-clássicas, associando-se primeiramente como dímeros e após *via* ligações de hidrogênio aromática, onde se dá o aumento unidimensional da cadeia do complexo (**1**). A distorção da geometria se dá em função do ligante triazenido se coordenar em ponte ao íon metálico.

Agradecimentos

CAPES, CNPq

¹ Moore, D.S.; Robson, S.D; *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.*; **1986**, *30*, 1-68.

² BRANDENBURG, K.; *DIAMOND*, Version 2.1e. Crystal Impact GbR, Bonn, Germany; **2001**.