

Síntese, Caracterização e Estrutura Cristalina e Molecular de 1-(metil)-3-(2-(4-fenil-1,2,3-triazol)triazeno-*N*-óxido) e os Complexos de Cu(II) e Au(I)

Dieisson Morgan* (PG), Gustavo L. Paraginski (PG), Priscilla J. Zambiasi (PG), Vanessa T. K. Paraginski (PG), Manfredo Horner (PQ).
*d.morgan7@hotmail.com

¹Núcleo de Investigação de Triazenos e Complexos – NITriCo, Departamento de Química, UFSM, CEP 97.110-900, Santa Maria-RS.

Palavras Chave: Difração de raios-X, Triazeno-*N*-óxido, Triazol, Complexos de Au(I) e Cu(II).

Introdução

Azidas são muito utilizadas em síntese orgânica, incluindo a síntese de triazenos, e também de triazóis através da recente "click chemistry"¹. Os compostos triazenidos *N*-óxidos são conhecidos por serem utilizados como agentes quelantes entre outras funcionalidades².

Neste trabalho é apresentada a síntese e a caracterização estrutural dos compostos inéditos 1-(metil)-3-(2-(4-fenil-1,2,3-triazol)triazeno-*N*-Óxido) (**1**) e complexos [(C₆H₄(N₃C₂HC₆H₅)NNN(O)CH₃)₂-Cu(II)] (**2**) e [(C₆H₄(N₃C₂HC₆H₅)NNN(O)CH₃-AuPPh₃)] (**3**).

Resultados e Discussão

O composto **1** foi sintetizado pela diazotização de 2-(4-fenil-1,2,3-triazol)anilina com NaNO₂ seguido do acoplamento de *N*-metil-hidroxilamina em meio ácido. Foram obtidos monocristais aptos à análise estrutural por difração de raios-X, que envolve o sistema cristalino monoclinico e o grupo espacial *P*2₁/*c*. O composto apresenta ligações N11–N12 = 1,348Å; N12–N13 = 1,272Å; N13–O1 = 1,041Å; e ângulos entre as ligações N11–N12–N13 = 110,03°; O1–N13–N12 = 125,10°.

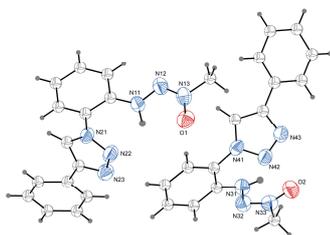


Figura 1: Projeção³ da estrutura de (**1**).

Os complexos **2** e **3** foram sintetizados pela reação de **1** em solução com posterior adição dos sais metálicos (AcO)₂Cu·H₂O e AuPPh₃Cl, respectivamente). Os complexos de Cu(II) e Au(I) foram caracterizados por difração de raios-X, ponto de fusão, espectroscopia na região do infravermelho, espectroscopia RMN ¹H e ¹³C (exceto o complexo **2**) e análise elementar. Cristais foram obtidos pela lenta evaporação dos solventes. O

complexo **2** cristaliza no sistema monoclinico, grupo espacial *P*2₁/*c* e apresenta índices finais de discordância para os reflexões R₁=0,057 e wR₂=0,101. Sua estrutura apresenta o átomo de cobre com geometria octaédrica, que incluem ligações Cu–O1 = 2,221 Å; Cu–O2 = 1,976 Å; Cu–N13 = 1,918Å; Cu–N33 = 1,981Å; Cu–N22 = 2,004Å. O complexo apresenta um íon Cu(II) ligado a dois ligantes triazenido-*N*-óxido coordenados em forma de quelato. O centro metálico de Cu(II) faz uma interação com o átomo de nitrogênio da cadeia triazol, com distância Cu···N22 = 2,764Å, interação que estende a coordenação octaédrica distorcida do íon Cu(II). O complexo **3** cristaliza no sistema triclinico e grupo espacial *P*-1. A estrutura do composto **3** apresenta o íon de Au(I) com geometria linear, onde o átomo de ouro coordena-se a um ligante triazenido, além do seu co-ligante fosfina, apresentando ângulo de ligação P–Au–N13 = 172,01°

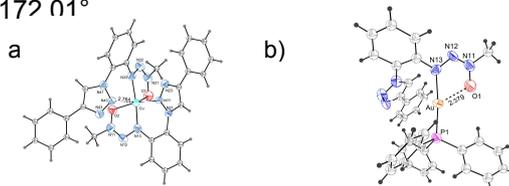


Figura 2: Projeções³ das estruturas cristalinas de **2** (a) e **3** (b).

Conclusões

O complexo **2** apresenta íon Cu(II) com esfera de coordenação octaédrica estendida com um afastamento Cu···N22=2,764 Å, incluindo pronunciado efeito de Jahn Teller do íon Cu(II). O complexo **3** apresenta o íon Au(I) com geometria linear, e uma interação Au···O = 2,579Å.

Agradecimentos



¹ Rostovtsev, V. V.; Green, L. G.; Fokin, V. V.; Sharpless, K. B. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2002**, 41, 2596.

² Chauhan, L. S.; Jain, C. P.; Goswami, A. K. *J. Chem. Pharm. Res.* **2010**, 2, 539.

³ DIAMOND, Version 3.1, CRYSTAL IMPACT, Postfach 1251, 53002 Bonn, Germany.