

## Avaliação Espectroscópica de Complexos Homoléticos com o ligante Ácido kójico.

Verônica da S. Oliveira<sup>1</sup>(PG)\*, Wendy M. T. Q. de Medeiros<sup>1</sup>(PG), Francimar L. de Souza Jr.(IC), Francisco O. N. da Silva<sup>1</sup>(PQ), Ana C. F. de Brito<sup>1</sup>(PQ), Daniel de L. Pontes<sup>1</sup>(PQ).

<sup>1</sup>Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Instituto de Química, Natal RN. \*Verinha\_oliver@yahoo.com.br

Palavras Chave: complexos, ácido kójico.

### Introdução

O 5-hidroxi-2-hidroximetil-γ-pirano é um ácido orgânico, comumente denominado de ácido kójico (AK)<sup>1</sup>. Este ácido tem sido alvo de diversos estudos devido principalmente as suas propriedades biológicas e as diferentes possibilidades de modificações em sua estrutura<sup>2</sup>. Esta substância é particularmente interessante para a química de coordenação por apresentar átomos de oxigênio propícios à interação com centros metálicos.

Este trabalho tem como objetivo avaliar as características espectroscópicas dos compostos de coordenação homoléticos de Al<sup>3+</sup>, Fe<sup>3+</sup> e Ru<sup>3+</sup>, apresentando o íon kójico (kj) como ligante.

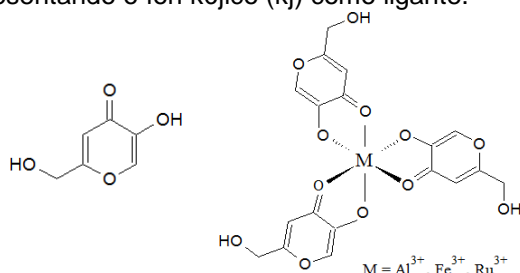


Figura 1. Estrutura Química do ácido kójico e proposição estrutural para os complexos (à direita).

### Resultados e Discussão

O espectro Uv-Vis, do AK em meio aquoso possui bandas localizadas em 215 e 269 nm ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ). Os complexos  $[M(kj)_3]$ , onde  $M = Al^{3+}$ ,  $Fe^{3+}$  e  $Ru^{3+}$  também apresentaram bandas correspondentes as bandas intraligantes do AK, sendo a transição mais energética deslocada para maiores comprimentos de onda e localizada nos três complexos em 220 nm. Já na região do visível, o composto de ferro exibiu duas bandas em 404 e 450 nm, enquanto que o complexo de  $Ru^{3+}$ , apenas uma banda em 390, referentes a transições LMCT do íon kójico ( $\pi kj \rightarrow d\pi M^{3+}$ ). Não foi observada banda de transferência de carga para o complexo de  $Al^{3+}$ . Adicionalmente, o composto  $[Ru(kj)_3]$  apresentou ainda bandas em 510 e 730 nm, com baixo valor de absorvidade, atribuídas a transições  $d-d$ .

Os espectros de IV dos complexos sintetizados exibiram bandas referentes aos estiramentos C=O e C=C deslocadas para menores valores, comparativamente ao ligante livre, de forma semelhante ao observado para complexos com ligantes da mesma classe química do ácido kójico, como o maltol<sup>3</sup>, sendo tal variação atribuída ao

efeito da coordenação ao metal. De acordo com os deslocamentos observados para cada um dos complexos, foi possível correlacionar o estiramento da carbonila com os raios iônicos dos respectivos centros metálicos no estado de oxidação III, sendo verificada uma excelente linearidade entre os pontos.

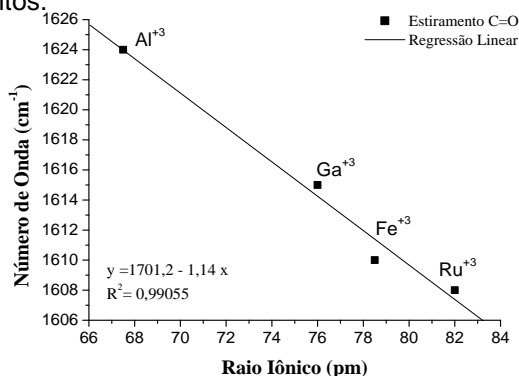


Figura 3. Raio iônico do centro metálico versus  $\nu C=O$  dos complexos de  $Al^{3+}$ ,  $Ga^{3+}$ ,  $Fe^{3+}$  e  $Ru^{3+}$ .

Através do gráfico, é observado que quanto maior o raio iônico, maior a deslocalização da densidade eletrônica do ligante para o metal, sendo melhor acomodada nos orbitais  $d$  da camada de valência, proporcional aos volumes desses orbitais. Linearidade semelhante também foi encontrada neste trabalho para complexos  $[M(kj)_2]$ , onde  $M = Cu^{2+}$ ,  $Zn^{2+}$  e  $Fe^{2+}$ ,

### Conclusões

As técnicas espectroscópicas empregadas comprovaram que os complexos sintetizados apresentaram os íons kójico coordenados aos centros metálicos de alumínio, ferro e rutênio e que a densidade eletrônica do ligante é efetivamente mais deslocalizada no complexo  $[Ru(kj)_3]$ . Os dados de IV demonstraram ainda que o valor do  $\nu C=O$  nos complexos é diretamente dependente da natureza do centro metálico, podendo ser correlacionado com o raio iônico do metal.

### Agradecimentos

PPGQ/UFRN, LQCPol e a CAPES.

<sup>1</sup> Burdock, G. A.; Soni, M. G. e Carabin, I. G.; *Reg. Tox. and Pharm.*; **2001**, 33, 80.

<sup>2</sup> Brtko, J.; Rondahl, L.; Ficková, M.; Hudecová, D.; Eybl, V. e Uher, M.; *Cent Eur J Publ Health*; **2004**, 12, 16.

<sup>3</sup> Finnegan, M. M.; Lutz, T. G.; Nelson, W. O.; Smith, A. e Orvig, C.; *Inorg.Chem.*; **1987**, 26, 2175.