

Síntese e estrutura de um novo complexo trinuclear de Cobre(II) de relevância bioinorgânica

Ricardo Alexandre Alves de Couto(PG)*, Rosely Aparecida Peralta(PQ), Adailton J. Bortoluzzi(PQ), Ademir Neves(PQ)

Universidade federal de Santa Catarina, Departamento de Química, Laboratório de Bioinorgânica e Cristalografia – 88040-900, Florianópolis – SC, Brasil. *ricalexcouto@hotmail.com

Palavras Chave: Bioinorgânica, Complexo trinuclear de cobre(II), Estrutura

Introdução

Complexos polinucleares de cobre têm chamado atenção devido às suas propriedades magnéticas e sua relevância para o centro ativo de diversas metaloenzimas como cobre oxidases, que oxidam polifenóis e proteínas transportadoras de oxigênio.¹ Desta maneira, apresenta-se neste trabalho um novo complexo trinuclear de cobre(II) com o ligante 2-[bis-(piridin-2-metil-amino)-metil]-6-metoximetil-4-metil-fenol (HL).

Resultados e Discussão

O ligante HL foi sintetizado a partir de uma rota similar à do ligante H₂BPBPMP², sendo este preparado pela reação entre BPMAMCF.HCl e metanol em refluxo por 24 horas e extração com uma solução aquosa de bicarbonato de sódio e o ligante HL foi obtido. O ligante foi caracterizado por espectroscopia no infravermelho e RMN ¹H.

RMN ¹H (ppm): 2,24 (s, 3 H); 3,45 (m, 3H); 3,80 (s, 2 H); 3,90 (s, 6H), 6,82-7,72 (m, 6 H); 8,57 (m, 2H).

IV (cm⁻¹): ν (C-H_{Ar} e C-H_{Alif}) 3056-2871; ν (C=N e C=C) 1594-1480; δ (O-H_{fenol}) 1375; ν (C-O_{fenol}) 1268; ν (C-N) 1117; δ (C-H_{Ar}) 761.

O complexo [Cu₃L₂(μ-OAc)₂](ClO₄)₂ (**1**) foi sintetizado adicionando-se à uma solução metanólica do ligante HL (1,0 mmol), perclorato de sódio (1,0 mmol) e acetato de cobre(II) (1,5 mmol). Monocristais adequados à resolução da estrutura por difratometria de raios X foram obtidos a partir da solução mãe (estrutura ilustrada abaixo).

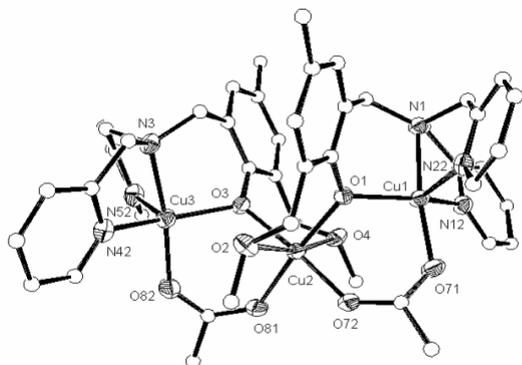


Figura 1. Ortep³ do cátion complexo 1.

O grupo espacial é triclinico, P-1. Reflexões coletadas=9898, R= 0,1038, R_w=0,1871.

Os centros de cobre Cu(1) e Cu(2) estão ponteados por um oxigênio fenólico e por um acetato exógeno, assim como o Cu(2) e Cu(3) de maneira centro simétrica. A esfera de coordenação do centro de cobre Cu(2) é composta por 6 átomos, sendo O(1) e O(3) de grupos fenólicos equivalentes coordenados em posição cis entre si oriundos dos acetatos ponte exógenos e completando a esfera de coordenação os O(2) e O(4) da função éter do ligante posicionados de maneira *trans* conferindo ao Cu(2) uma geometria octaédrica. A esfera de coordenação do Cu(1) é completada por três nitrogênios N(1), N(22) e N(12), resultando em uma geometria piramidal de base quadrada (τ=0,41), que é similar ao Cu(3) (τ=0,34) sendo que neste os átomos de nitrogênio são N(3), N(42) e N(52).

Para o centro de Cu(2) a média dos comprimentos de ligação é 2,135 Å e para os centros de cobre Cu(1) e Cu(3) a média dos comprimentos de ligação foi muito próxima, sendo 2,025 Å e 2,024 Å respectivamente. A distância entre dois centros metálicos ficou semelhante, 3,2971 Å para o Cu(2)-Cu(3) e 3,3037 Å para Cu(1)-Cu(2). A distância de ligação em torno de 3,3 Å entre os centros metálicos sugere que este complexo pode ser utilizado para estudos de reatividade do substrato 3,5-di-*tert*-butilcatecol já que é reportado na literatura que complexos com distâncias intermetálicas menores de 5 Å são necessárias para ocorrer a catálise.⁴

Conclusões

Um novo ligante assimétrico foi sintetizado e caracterizado por IV e RMN ¹H e foi utilizado na síntese de um novo complexo trinuclear de cobre(II) que foi caracterizado por cristalografia de raios X.

Agradecimentos

DQ/UFSC e CNPQ.

¹ Spiccia, L. *et al.* *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, **1997**, 4089.

² Karsten, P.; Bortoluzi, A. J.; Lanznaster, M.; Drago, V. e Neves, A. *Inorg. Chem. Comm.* **2002**, 41, 4624.

³ Farrugia, L. J., ORTEP3 for windows, *J. Appl. Crystallogr.* **30**, **1997**, 565.

⁴ Than R.; Feldmann, A. A. e Krebs, B. *Coordination Chemistry Reviews*, **1999**, 182, 211.