

Novos Complexos de Molibdênio(VI): $[\text{MoO}_2(\text{Hanh})_2]$ e $[\text{MoO}_2(\text{anh})]_n$ ($\text{H}_2\text{anh} = \text{Ácido Nicotinohidroxâmico}$)

Wellington Sousa de Oliveira (IC)¹, André Gustavo de Araujo Fernandes (PG)¹, Victor Marcelo Deflon (PQ)^{1*}, Sebastião de Souza Lemos (PQ)¹, Alzir Azevedo Batista (PQ)², Javier Ellena (PQ)³, Eduardo Ernesto Castellano (PQ)³. * deflon@unb.br

1 – Instituto de Química, Universidade de Brasília, Brasília (DF)

2 – Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos (SP)

3 – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos (SP)

Palavras Chave: molibdênio(VI), ácido nicotinohidroxâmico, quelato-complexos.

Introdução

Complexos do tipo $[\text{MoO}_2(\text{L})_2]$ (L = ligante quelante bidentado) tem sido extensivamente caracterizados, como modelos para molibdênio oxotransferases.¹ Ácidos hidroxâmicos são bioligantes importantes. Ocorrendo naturalmente, estão envolvidos no transporte de ferro e possuem usos terapêuticos. Sua atividade biológica está relacionada com sua habilidade de formar quelato-complexos estáveis com uma boa quantidade de metais.² Ácidos Hidroxâmicos também são conhecidos pela sua presença e influência em fatores de crescimento, assim como pelas propriedades de aditivos alimentares, antibióticos, antagonistas de antibióticos, inibidores de tumores, agentes antifúngos, processos de divisão celular e de enzimas biológicas.³

Este trabalho consiste no estudo da complexação do ácido nicotinohidroxâmico ao centro MoO_2^{2+} , em reações a partir de $[\text{MoO}_2(\text{acac})_2]$.

Resultados e Discussão

Os complexos $[\text{MoO}_2(\text{Hanh})_2]$ (**1**), $[\text{MoO}_2(\text{anh})]_n$ (**2**), $\text{H}_2\text{nch} = \text{ácido nicotinohidroxâmico}$, foram obtidos quantitativamente na forma de sólidos laranja e amarelo-claro, a partir de reações estequiométricas de $[\text{MoO}_2(\text{acac})_2]$ e H_2anh , 1:2 e 1:1, respectivamente, em MeOH. A caracterização foi feita por IV, ¹H- e ¹³C-RMN e análise elementar.

Cristais de $1 \cdot \text{H}_2\text{O}$, adequados para difração de raios X, foram obtidos por recristalização de **1** em MeOH e sua estrutura foi determinada.

Tabela 1: Dados cristalográficos para $1 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Sistema cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	$P2_1/a$
<i>a</i> (pm)	737,1(5)
<i>b</i> (pm)	2753,6(5)
<i>c</i> (pm)	812,6(5)
<i>b</i> (°)	112,648(5)
Z / S	4 / 1,141
$R_1 / wR_2 [I > 2\sigma(I)]$	0,0374 / 0,0820

Tabela 2: Dados da análise elementar (% , enc./cal.)

Complexo	C	H	N
1	36,45/35,84	2,83/2,51	13,93/13,93
2	26,75/27,29	2,10/1,53	10,32/10,61

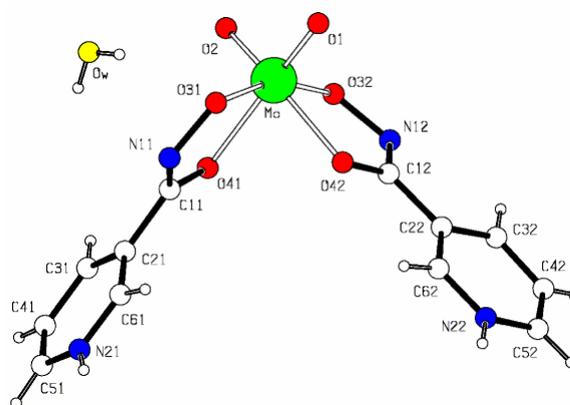


Figura 1. Estrutura cristalina e molecular de $1 \cdot \text{H}_2\text{O}$.

A estrutura do $1 \cdot \text{H}_2\text{O}$ apresenta o átomo de molibdênio(VI) hexacoordenado, na forma de um cis-dioxocomplexo, no qual o ligante quelante apresenta-se monoaniônico e O,O-bidentado, como nicotinohidroxamato. No complexo **2**, propõe-se que o ligante se coordena como diânion, nicotinohidroximato, em ponte entre centros de MoO_2^{2+} , formando um polímero de coordenação.

Conclusões

Os quelato-complexos de Molibdênio(VI) contendo o monoânion e o diânion do ácido nicotinohidroxâmico, $[\text{MoO}_2(\text{Hanh})_2]$ e $[\text{MoO}_2(\text{anh})]_n$, respectivamente, se formam prontamente, em reações quantitativas, em metanol. Os complexos apresentam-se apropriados para uso como novos modelos em estudos visando o mimetismo de molibdênio oxotransferases.

Agradecimentos

FINATEC, FINEP (Infra nº 097/01) e CNPq

¹ Lippard, S. J.; Berg, J. M.; "Principles of Bioinorganic Chemistry", University Science Books, Mill Valley, California, 1994, 322.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

² Kurzak, B.; Koslowski, H.; Farkas, E.; *J. Chem. Soc. Dalton Trans.*, **1992**, *114*, 169-200.

³ Liu, S.; Shan, G.; *Inorg. Química Acta*, **1998**, *282*, 149-154.