

Síntese e caracterização do complexo $[\text{Fe}(\text{HPCINOL})\text{Cl}]_2 \cdot \mu\text{-O}$. Evidência cristalográfica da degradação do ligante HPCINOL

Gabrieli L. Parrilha¹ (PG)*, Adolfo Horn Jr.¹ (PQ), Christiane Fernandes¹ (PQ), Lorenzo do C. Visentin² (PQ), Manfredo Horner² (PQ), Valderes Drago³ (PQ) *gabil@uenf.br

¹ LCQUI – UENF – Campos dos Goytacazes/RJ ² DQ – UFSM – Santa Maria/RS ³ DF – UFSC – Florianópolis/SC

Palavras Chave: complexo de ferro, ligante tripodal, caracterização estrutural.

Introdução

O ligante N,N-bis(piridin-2-ilmetil)[(3-cloro)(2-hidroxi)]propilamina (HPCINOL) tem sido utilizado pelo nosso grupo de pesquisa na síntese de compostos de interesse bioinorgânico, já tendo sido utilizado na síntese de compostos de cobre¹ e ferro,² gerando compostos com ação sobre células cancerosas³ e também sobre fungos e bactérias.⁴

Quando complexado com $\text{Fe}(\text{SO}_4) \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, o ligante HPCINOL dá origem a um composto binuclear com ponte oxo.² Quando complexado com $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ na presença de íons NO_3^- , obtêm-se compostos mono e binucleares.⁵

Neste trabalho relatamos o resultado da complexação do ligante HPCINOL com $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, o qual resultou no composto binuclear $[\text{Fe}(\text{HPCINOL})\text{Cl}]_2 \cdot \mu\text{-O} \cdot \text{NO}_3 \cdot \text{OH}$ **1**, contendo íons cloreto coordenados aos átomos de ferro, sendo que tais íons só podem ser provenientes da degradação do ligante HPCINOL após complexação com ferro.

Resultados e Discussão

O complexo **1** foi obtido de acordo com o esquema de síntese apresentado na Figura 1. Após a evaporação de todo o solvente, um óleo avermelhado foi formado, o qual deu origem a monocristais vermelhos (rendimento: 2,1 %). Os cristais foram analisados por difração de raios X de monocristal (Figura 1), a qual revelou que o composto é um complexo binuclear de ferro contendo uma ponte oxo. Cada átomo de ferro ainda está coordenado por uma molécula do ligante HPCINOL e por um íon cloreto. Vale destacar que em nenhum momento foi adicionado íon cloreto à síntese, o que denota que o mesmo só pode ser proveniente da degradação do ligante HPCINOL. Tal consideração também justifica o fato do composto só ser isolado após a formação de um óleo viscoso, bem como o baixo rendimento obtido. Na estrutura do composto ainda é observado um íon nitrato e um íon OH^- , atuando ambos como contra-íons. O composto também foi analisado por espectroscopia Mössbauer ($\delta = 0,32 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$, $\Delta E_q = 0,97 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$), sendo que os parâmetros obtidos concordam com a presença de íons Fe^{III} , confirmando a necessidade da presença do íon OH^- para o balanço das cargas.

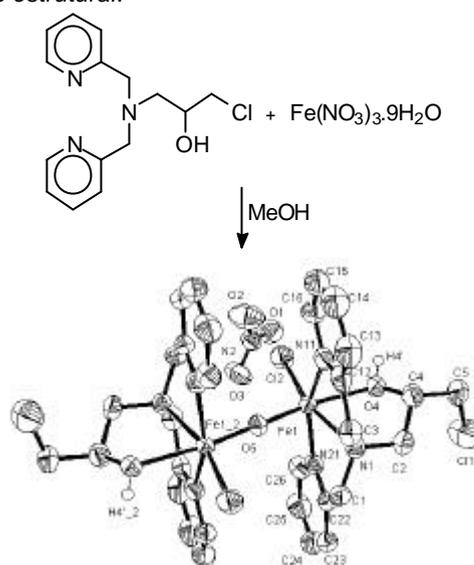


Figura 2. Síntese do complexo **1** apresentando sua estrutura cristalina obtida por difração de raios X de monocristal. Distâncias (Å) e ângulos (°) selecionados: Fe1-O5 1,786; Fe1-N21 2,117; Fe1-N11 2,131; Fe1-N1 2,205; Fe1-O4 2,241; Fe1-Cl2 2,291; O5-Fe1-Cl2 104,09; O5-Fe1-N21 92,06; O5-Fe1-N11 91,42; O5-Fe1-N1 94,15; Cl2-Fe1-O4 86,21; Cl2-Fe1-N21 101,72; Cl2-Fe1-N11 101,69; N1-Fe1-N21 77,08; N1-Fe1-O4 75,57; N1-Fe1-N11 77,69; N11-Fe1-O4 84,29; N21-Fe1-O4 87,84; Fe1-O5-Fe12 180,00.

Conclusões

A presença de íons cloreto coordenados aos átomos de ferro são provenientes da degradação do ligante HPCINOL.

Agradecimentos

UENF, FAPERJ, CNPq.

¹ Horn Jr., A.; Fernandes, C.; Bortoluzzi, A. J.; Vugman, N. V. e Herbst, M. H. *Journal of Molecular Structure* **2005**, 749, 96.

² Parrilha, G. L.; Horn Jr., A.; Fernandes, C. e Bortoluzzi, A. J. *XII BMIC*, São Carlos, **2004**.

³ Fernandes, C.; Parrilha, G. L.; Lessa, J. A.; Santiago, L. J. M.; Kanashiro, M. M.; Boniolo, F. S.; Bortoluzzi, A. J.; Vugman, N. V.; Herbst, M. H. e Horn Jr., A. *Inorganica Chimica Acta* **2006**, 359, 3167.

⁴ Silva, M. J. R.; Parrilha, G. L.; Horn Jr., A.; Vieira-da-Mota, O. e Fernandes, C. *29ª Reunião Anual da SBQ*, Águas de Lindóia, **2006**.

⁵ Parrilha, G. L.; Horn Jr., A.; Fernandes, C.; Visentin, L. do C.; Horner, M. e Drago, V. *XIII BMIC*, Fortaleza, **2006**.