

Um novo ligante estendido: dipiridoquinoxalinoquinoxalino (dpq-QX)

Fabio da Silva Miranda^{1*}(PG), Norberto Sanches Gonçalves¹(PQ), Aline Maria Signori¹(IC), Fabrício Gava Menezes²(PG) miranda@qmc.ufsc.br.

¹Laboratório de Estrutura e Espectroscopia Molecular, ²Laboratório de Catálise Bioorgânica, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Cep-88040-900, CP.476.

Palavras Chave: *a, a'*-diiminas, transferência de carga, B3LYP.

Introdução

São muitos os esforços para o desenvolvimento de moléculas com interessantes propriedades ópticas. Nesse contexto estamos desenvolvendo ligantes derivados da 1,10-fenantrolina através do aumento do sistema π conjugado, essa classe de ligantes é conhecida por formar compostos de coordenação com Ru(II) que são fotoluminescentes e que interagem fortemente com o DNA. Com Fe(II) formam complexos de transferência de carga com cores intensas [1,2].

Resultados e Discussão

O ligante em questão foi sintetizado através da condensação da 5,6-diona-1,10-fenantrolina (qphen) e 2,3-diaminoquinoxalina (ver Fig. 1).

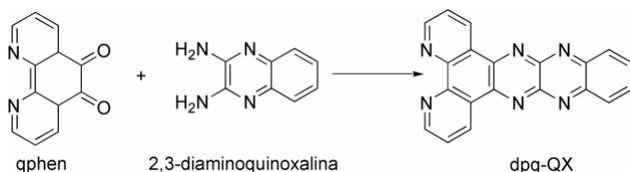


Figura 1. Síntese.

O novo ligante foi caracterizado por RMN ¹H e ¹³C e espectroscopia Raman, sendo notada a forte intensidade (ver Fig. 2) dos modos em c.a. 1375 e 1355 cm^{-1} atribuídos a estiramentos C-N.

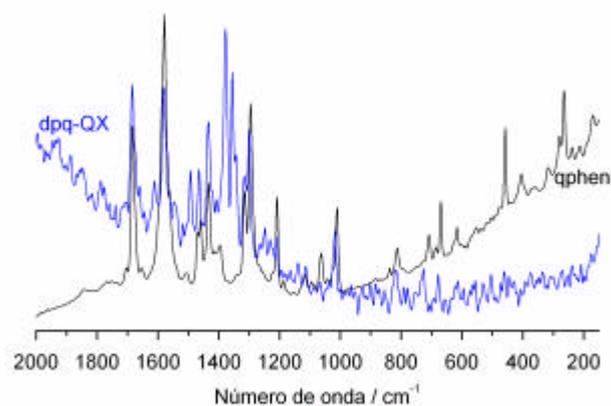


Figura 2. Espectros FT-Raman (excit. = 1064 nm) do ligante dpq-QX e do precursor qphen.

Como se pode ver pela superfície de potencial eletrostático (ver Fig. 3), o ligante possui uma grande densidade de elétrons nos nitrogênios das duas pirazinas ligadas, o que torna esse ligante um excelente candidato para interagir com DNA, realizar protonações, complexação com íons metálicos pequenos e associação com substratos orgânicos com tendência a formação de ligações de hidrogênio. O dpq-QX possui dois LUMOs energeticamente acessíveis, mas somente o segundo LUMO possui simetria apropriada para receber carga em uma TCML.

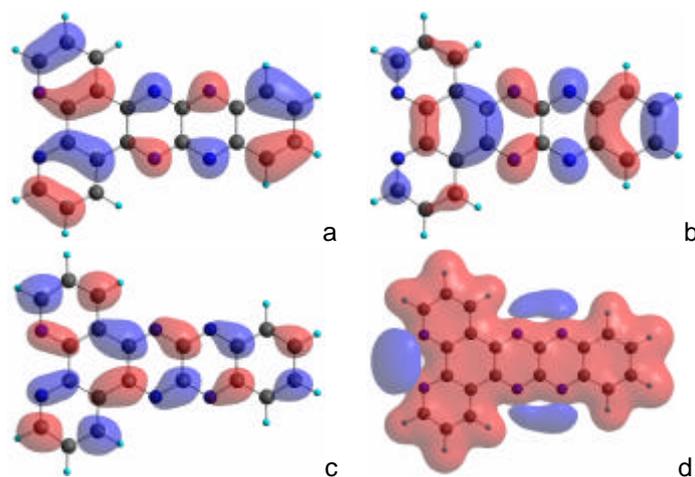


Figura 3. (a) HOMO; (b) LUMO; (c) LUMO₊₁ e (d) Potencial eletrostático.

Os primeiros testes de complexação com Fe(II), resultaram em compostos de cor vermelha intensa, como já observado na literatura para a fenantrolina.

Conclusões

Os complexos do ligante dpq-QX com Ru(II) e Fe(II) são fortes candidatos para fotocélulas, materiais electrocromicos, intercaladores de DNA, entre outras aplicações.

Agradecimentos

Os autores agradecem a UFSC, ao CNPq (processo 478999/2003-8), à Central de Análises, ao Msc. Ângelo Ruzza e ao LEM-IQUSP.

¹Arancibia, A; et. al. *J. Coord. Chem. Soc.* **2001**, 54, 323.

²Waterland, M. R.; Gordon, K.C.; McGarvey, J.J; Jayaweera, P.M.
J. Chem. Soc. Dalton transaction **1998**, 609.