

## Estudos iniciais do comportamento de complexação dos ligantes paeo e CH<sub>3</sub>-paeo com ferro(III). Estrutura de raios X do composto Fe(paeo)Cl<sub>3</sub>

Marcione D. E. Tiradentes<sup>1</sup> (IC)\*, Valéria T. da Silva<sup>1</sup> (IC), Sarah da S. Ferreira<sup>1</sup> (PG), Érika S. Bull<sup>1</sup> (PG), Christiane Fernandes<sup>1</sup> (PQ), Adolfo Horn Jr.<sup>1</sup> (PQ), Adailton J. Bortoluzzi<sup>2</sup> (PQ), Valderes Drago<sup>3</sup> (PQ) marcionetiradentes@yahoo.com.br

<sup>1</sup>LCQUI, UENF, Campos dos Goytacazes/RJ. <sup>2</sup>DQ, UFSC, Florianópolis/SC. <sup>3</sup>DF, UFSC, Florianópolis/SC

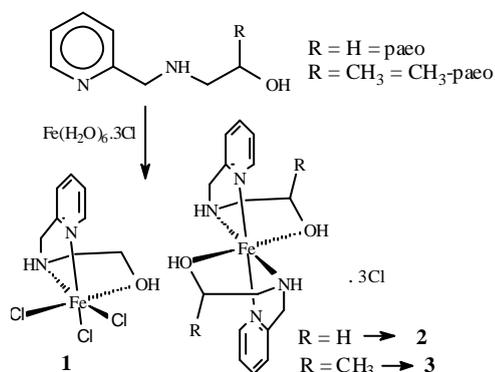
Palavras Chave: complexos mononucleares, ferro(III), ligante tripodal, ligante nitrogenado.

### Introdução

O emprego de ligantes tridentados e tetradentados no estudo da química de coordenação de ferro tem possibilitado a síntese de compostos miméticos para diversas metaloenzimas que contêm ferro em seu sítio ativo.<sup>1,2</sup>

Com o objetivo de preparar compostos que possam servir de modelos sintéticos para metaloenzimas de ferro, relatamos aqui os estudos iniciais de complexação dos ligantes 2-[piridin-2-ilmetil]amino]etanol (paeo) e 1-[(piridin-2-ilmetil)-amino]propan-2-ol (CH<sub>3</sub>-paeo) com Fe(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>.3Cl.

### Resultados e Discussão

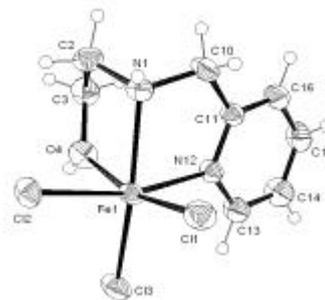


**Figura 1.** Esquema de síntese dos compostos 1, 2, 3.

As reações foram feitas usando quantidades estequiométricas dos ligantes e do sal metálico. Na síntese empregando o ligante paeo, os compostos 1 e 2 foram obtidos. O composto 2 precipita imediatamente, enquanto 1 cristaliza da solução mãe. A estrutura de 1 foi resolvida por difração de raios X (Figura 2). O composto 3 foi obtido após evaporação do solvente, sendo o único produto da reação empregando o ligante CH<sub>3</sub>-paeo.

O composto 1 apresenta um espectro Mössbauer composto por um duplete ( $d = 0,34 \text{ mm.s}^{-1}$ ;  $DE_Q = 0,54 \text{ mm.s}^{-1}$ ), enquanto que para 2 e 3, o espectro Mössbauer apresenta apenas um singuleto com  $d = 0,34 \text{ mm.s}^{-1}$ . Este resultado indica que a simetria de

2 e 3 deve ser muito maior do que a do composto 1. A espectroscopia de infravermelho mostra que as frequências de vibração NH são similares nos compostos 2 (3232 cm<sup>-1</sup>) e 3 (3234 cm<sup>-1</sup>), diferindo significativamente do composto 1 (3251 cm<sup>-1</sup>). Assim, devido a similaridade dos dados de Mössbauer e de infravermelho de 2 e 3, propõe-se que os mesmos possuam o íon ferro(III) coordenado por duas moléculas dos seus respectivos ligantes, enquanto que a estrutura de raios X confirma que o composto 1 possui apenas uma molécula do ligante coordenado ao íon férrico, sendo esta a razão de apresentar dados de Mössbauer e de infravermelho distintos de 2 e 3. Para confirmar as diferenças estruturais, foram realizadas sínteses empregando uma estequiometria 2:1 (ligante:metal) e, de acordo com os dados de



Mössbauer e de infravermelho, somente os compostos 2 e 3 foram obtidos.

**Figura 2.** ZORTEP da estrutura do composto 1. Principais distâncias (Å) de ligações: Fe(1)-N(12) 2.154(3); Fe(1)-O(4) 2.158(2); Fe(1)-N(1) 2.184(3); Fe(1)-N(1) 2.184(3); Fe(1)-Cl(3) 2.2633(9); Fe(1)-Cl(1) 2.2683(10); Fe(1)-Cl(2) 2.3587(10).

### Conclusões

Na metodologia de síntese empregada, o ligante paeo deu origem a dois compostos, sendo eles o Fe(paeo)Cl<sub>3</sub> e [Fe(paeo)<sub>2</sub>](Cl)<sub>3</sub>, enquanto que com o emprego do ligante CH<sub>3</sub>-paeo, apenas o complexo [Fe(CH<sub>3</sub>-paeo)<sub>2</sub>](Cl)<sub>3</sub> foi obtido.

### Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERJ

<sup>1</sup> Carvalho, N. M. F.; Horn, A. Jr.; Faria, R. B.; Bortoluzzi, A. J.; Drago, V. e Antunes, O. A. C. *Inorg. Chim. Acta*, **2006**, 359, 4250.

<sup>2</sup> Carvalho, N. M. F.; Horn, A. Jr.; Bortoluzzi, A. J.; Drago, V. e Antunes, O. A. C.; *Inorg. Chim. Acta*, **2006**, 359, 90.