

Síntese e caracterização de compostos de Zn^{2+} e Co^{2+} com o pró-ligante $\text{H}_2\text{BPCINOL}$

Vagner M. de Assis¹ (IC)*, Christiane Fernandes¹ (PQ), Adolfo Horn Jr¹ (PQ), Adailton J. Bortoluzzi² (PQ), Rodrigo R. Catharino³ (PQ), Marcos N. Eberlin³ (PQ), Mario Benassi³ (PG) *vagnerassis@gmail.com

¹LCQUI – UENF – Campos dos Goytacazes/RJ, ²DQ – UFSC – Florianópolis/SC; ³Lab .ThoMSon – Unicamp – Campinas/SP

Palavras Chave: complexo de Zn, complexo de Co, raios X

Introdução

Quando complexado com $\text{Fe}(\text{ClO}_4)_3$ o pró-ligante $\text{H}_2\text{BPCINOL}$ (N-(2-hidroxibenzil)-N-(2-piridilmetil)[(3-cloro)(2-hidroxi)]propilamina) resulta no cátion $[\text{Fe}_2(\text{BPCINOL})_2(\text{H}_2\text{O})_2]^{2+}$,¹ o qual apresentou atividade de nuclease sintética, sendo que quando complexado com $\text{Ni}(\text{ClO}_4)_2$ na presença de NaOAc, obtém-se o cátion $[\text{Ni}_2(\text{HBPCINOL})_2(\text{OAc})]^+$,² modelo sintético da urease. Já na presença de $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, resulta na molécula mononuclear $\text{Cu}(\text{H}_2\text{BPCINOL})\text{Cl}$,³ a qual apresenta atividade citotóxica sobre células cancerígenas.

Visando a obtenção de novos complexos que sejam de interesse bioinorgânico estamos apresentando aqui a síntese e caracterização de compostos de Co^{2+} e Zn^{2+} com o ligante supracitado, sendo também apresentado a estrutura de raios X do composto de zinco.

Resultados e Discussão

Os complexos foram sintetizados pela reação de quantidades estequiométricas do pró-ligante $\text{H}_2\text{BPCINOL}$ com ZnCl_2 na presença de NaOAc para a obtenção de $\text{Zn}(\text{HBPCINOL})\text{Cl}$ **1** e de $\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6\text{Cl}_2$ para a obtenção de $\text{Co}(\text{H}_2\text{BPCINOL})\text{Cl}_2$ **2**. Rendimento: 70% para **1** e 30% para **2**. CHN %Calc(%exp): C 47,26(46,79), H = 4,46(4,21) e N = 6,89(7,02) para **1** e C = 44,01(43,60), H = 4,39(4,47) e N = 6,42(6,42) para **2**. A condutivimetria indica que em metanol, ambos os compostos comportam-se como eletrólitos 1:1, indicando que o íon cloreto coordenado é deslocado do ambiente de coordenação dos metais quando em solução. Os espectros de infravermelho dos dois complexos são similares, sendo caracterizados principalmente pelas bandas do ligante, indicando que a coordenação dos íons metálicos ao ligante $\text{H}_2\text{BPCINOL}$ foi efetiva. Espectros de ESI-(+)-MS/MS indicam que espécies mononucleares e binucleares estão presentes em solução metanólica.

A obtenção de monocristais do composto **1** possibilitou a resolução da sua estrutura molecular por difração de raios X (Figura 1a), revelando que o íon Zn^{2+} está coordenado a um íon cloreto e a uma molécula do ligante $\text{H}_2\text{BPCINOL}$, sendo que o grupo

fenol está desprotonado e o grupo álcool está protonado, resultando em uma geometria bipirâmide trigonal distorcida.

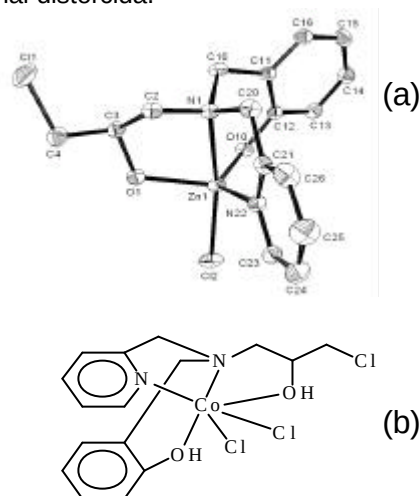


Figura 1. (a) ZORTEP para o complexo **1** e (b) proposta de estrutura para o composto **2**. Distâncias de ligações (Å) para **1**: Zn(1)-O(10) 1.982(3), Zn(1)-O(1) 2.083(3), Zn(1)-N(22) 2.108(4), Zn(1)-N(1) 2.253(4), Zn(1)-Cl(2) 2.2775(17).

Conclusões

As caracterizações realizadas revelam que o ligante $\text{H}_2\text{BPCINOL}$ apresenta comportamento de complexação frente aos cloretos de Zn^{2+} e Co^{2+} similar ao observado para o íon Cu^{2+} , gerando compostos mononucleares, mas diferente dos íons Fe^{3+} e Ni^{2+} , quando resultou em compostos binucleares.

Agradecimentos

CNPq, FAPERJ, UENF e FAPESP.

¹ Horn Jr, A.; Vencato, I.; Bortoluzzi, A.; Hoerner, R.; Nome, R. A.; Szpoganics, B.; Drago, V.; Terenzi, H.; Oliveira, M. C. B.; Werner, R.; Haase, W. e Neves, A. *Inorg. Chim. Acta*, **2005**, 358, 339.

² Horn, A. Jr.; Fim, L.; Bortoluzzi, A. J.; Szpoganicz, B.; Silva, M. de S.; Novak, M. A.; Benassi, M.; Eberlin, L. S.; Catharino R.R.; Eberlin, M. N.; Fernandes, C. *J. Mol. Struct.*, **2006**, 797, 154.

³ Bull, E. S.; Lessa, J. A.; Fernandes, C.; Horn, A. Jr.; Bortoluzzi, A. J.; Catharino, R. R.; Benassi, M.; Eberlin, M. N.; Kanashiro, M. M.; Cortes, F. H. In: XIII BMIC, Fortaleza. **2006**, 72.