

Novo Modo de Coordenação da 2,6-diacetilpiridinabenzoilhidrazona com Cobre(II)

Karine Rover (IC)^{1*}, Valéria S. Ferreira (IC)¹, Claudia C. Gatto (PQ)¹, Ernesto S. Lang (PQ)², Davi F. Back (PG)². *karinerover@gmail.com

¹Laboratório de Química Inorgânica Preparativa – Universidade de Brasília, Brasília (DF)

²Laboratório de Materiais Inorgânicos – Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria (RS)

Palavras Chave: complexo de cobre(II), hidrazona, difração de raios-X.

Introdução

Nos últimos anos os compostos de hidrazona vêm despertando interesses por sua capacidade quelante e atividade biológica, seus complexos metálicos também têm ganhado importância por agirem como inibidores de enzimas. Do mesmo modo a síntese, análise estrutural e reação de metais de transição com bases de Schiff, têm recebido atenção especial por causa da capacidade antitumoral, antiviral e antifúngica¹.

Já é conhecida a função antibiótica de hidrazonas e de seus complexos com os metais da primeira série de transição².

Resultados e Discussão

Neste trabalho relatamos a síntese, caracterização e estrutura de um novo complexo $\{[\text{CuBr}_2(\text{H}_2\text{dapbzh})_2]\cdot\text{CH}_3\text{CN}\cdot2\text{H}_2\text{O}$ (Fig. 1) que é obtido através da reação de CuBr_2 com H_2dapbzh em CH_3CN . Os dados da análise por difração de raios-X foram coletados em um difratômetro Brucker CCD APEX II e podem ser observados na Tabela 1.

Tabela 1. Dados cristalográficos do complexo $\{[\text{CuBr}_2(\text{H}_2\text{dapbzh})_2]\cdot\text{CH}_3\text{CN}\cdot2\text{H}_2\text{O}$.

Fórmula	$\text{C}_{48}\text{H}_{49}\text{N}_{11}\text{O}_6\text{Br}_4\text{Cu}_2$
Massa Molar	1322,70
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo Espacial	$P\bar{c}$
a (Å)	7,794(2)
b (Å)	13,556(3)
c (Å)	24,897(5)
$\beta(^{\circ})$	91,068(1)
Z	2

No composto $\{[\text{CuBr}_2(\text{H}_2\text{dapbzh})_2]\cdot\text{CH}_3\text{CN}\cdot2\text{H}_2\text{O}$ cada átomo de cobre(II) apresenta uma geometria pirâmide de base quadrada distorcida coordenando-se a dois átomos de bromo e a uma molécula do ligante H_2dapbzh , que possui cinco sítios de coordenação porém atua no complexo como tridentado e neutro, demonstrando assim um modo incomum de coordenação.

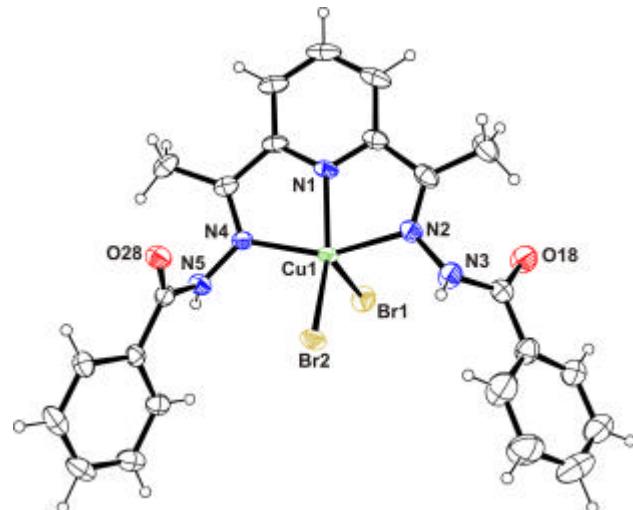


Figura 1. Representação ORTEP de $[\text{CuBr}_2(\text{H}_2\text{dapbzh})]$. Por motivo de clareza foram omitidas as moléculas de água, acetonitrila e a segunda molécula de $[\text{CuBr}_2(\text{H}_2\text{dapbzh})]$ que constituem a unidade assimétrica.

A estrutura foi calculada via métodos diretos e os átomos não hidrogenóides encontrados através do cálculo de sucessivas diferenças do mapa de Fourier, sendo o refinamento executado pelo método dos mínimos quadrados até $R_1=0,0402$ e $wR_2=0,0815$.

Conclusões

Este trabalho possibilita um estudo inovador na Química Inorgânica Estrutural, tendo em vista o modo inesperado e até hoje desconhecido de coordenação do ligante ao cobre(II).

Agradecimentos

CNPq

¹ Viñuelas-Zahínos, E.; Maldonado-Rogado, M. A.; Luna-Giles, F.; Barros-García, F. J. *Polyhedron*. **2008**, 27, 879.

² Carcelli, M.; Mazza, P.; Pelizzi, C.; Pelizzi, G.; Zani, F. J. *Inorg. Biochem.* **1995**, 57, 43.