

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 antifungicida¹.

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 $[\{CuBr_2(H_2dapbzh)\}_2] \cdot CH_3CN \cdot 2H_2O$ (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 $[\{CuBr_2(H_2dapbzh)\}_2] \cdot CH_3CN \cdot 2H_2O$.

Fórmula	$C_{48}H_{49}N_{11}O_6Br_4Cu_2$
Massa Molar	1322,70
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo Espacial	Pc
a (Å)	7,794(2)
b (Å)	13,556(3)
c (Å)	24,897(5)
β (°)	91,068(1)
Z	2

No composto $[\{CuBr_2(H_2dapbzh)\}_2] \cdot CH_3CN \cdot 2H_2O$ 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.

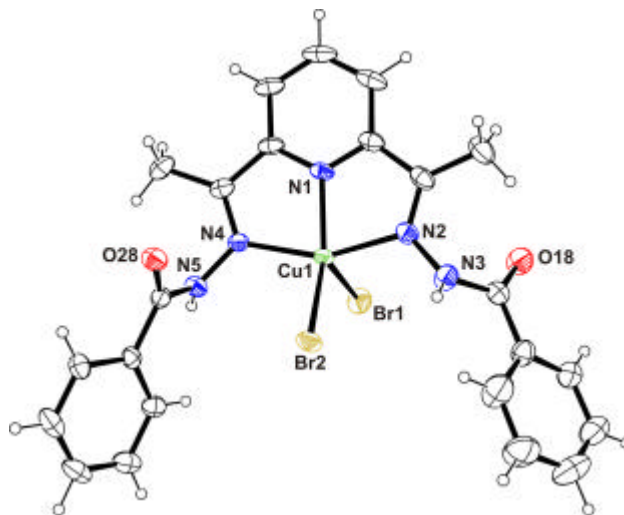


Figura 1. Representação ORTEP de $[CuBr_2(H_2dapbzh)]_2$. Por motivo de clareza foram omitidas as moléculas de água, acetonitrila e a segunda molécula de $[CuBr_2(H_2dapbzh)]$ que constituem a unidade assimétrica.

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-Zahinos, 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.