

## Síntese, estudo potenciométrico, caracterização por difração de raios X e por ESI-MS/MS de um novo composto binuclear de cobre

Rafaela O. Moreira <sup>1</sup>(IC)\*, Christiane Fernandes <sup>1</sup>(PQ), Adolfo Horn Jr <sup>1</sup>(PQ), Marcos N. Eberlin <sup>2</sup>(PQ), Lorenzo C. Visentin <sup>3</sup>(PQ), Bruno Szpoganicz <sup>4</sup>(PQ), Anderson Bastos <sup>4</sup>(IC).

rafaelaomoreira@gmail.com

<sup>1</sup>LCQUI – UENF – Campos/RJ <sup>2</sup> Laboratório ThoMson- IQ-Unicamp- Campinas/SP <sup>3</sup> IQ – UFRJ – Rio de Janeiro/RJ <sup>4</sup> Departamento de Química – UFSC – Florianópolis/SC

Palavras Chave: Binuclear, cobre, raios X, ESI-MS/MS, titulação potenciométrica.

### Introdução

Relatamos neste trabalho a caracterização físico-química de um novo composto de cobre:  $[\text{Cu}_2(\text{BPA})_2\text{Cl}_2]$ . Este foi obtido através da reação de dimerização do composto  $[\text{Cu}(\text{HBPA})\text{Cl}_2]\text{MeOH}$  em meio aquoso básico (pH 8,5), na presença de  $\text{CO}_2$  atmosférico. A estrutura cristalina mostra a obtenção de um composto binuclear de cobre contendo pontes fenolato entre os centros metálicos, não sendo observada a reação com o  $\text{CO}_2$  atmosférico. Resultados de titulação potenciométrica para o complexo mononuclear  $[\text{Cu}(\text{HBPA})\text{Cl}_2]\text{MeOH}$  indicaram que o pKa para a desprotonação da água é elevado (9,84) sugerindo que os centros metálicos apresentam baixa acidez de Lewis.

### Resultados e Discussão

O composto  $[\text{Cu}(\text{HBPA})\text{Cl}_2]\text{MeOH}$  foi caracterizado por técnicas convencionais de análise. O complexo  $[\text{Cu}_2(\text{BPA})_2\text{Cl}_2]$  foi caracterizado por IV, UV-Vis, raios X, ESI-MS/MS e eletroquímica. A caracterização por titulação potenciométrica indicou que o complexo  $[\text{Cu}(\text{HBPA})\text{Cl}_2]$  predomina na faixa de pH de 4,1 a 9,7. Em 9,84 ocorre a desprotonação da molécula de água coordenada ao centro de cobre. A espécie binuclear é formada em pequena quantidade (menos de 3%), como resultado da desprotonação do grupo fenol do ligante.

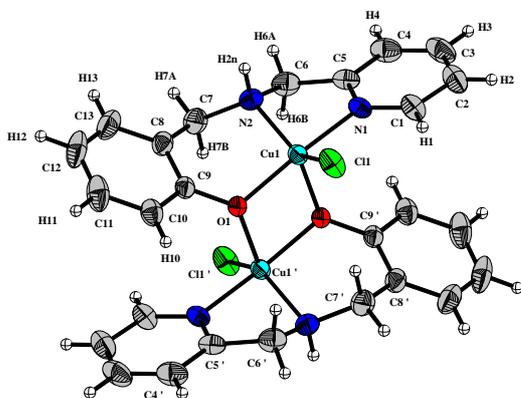


Figura 1. Estrutura de raios X para o complexo  $[\text{Cu}_2(\text{BPA})_2\text{Cl}_2]$ .

A caracterização por ESI-MS/MS para o complexo  $[\text{Cu}_2(\text{BPA})_2\text{Cl}_2]$  indica a presença de espécies mononucleares em solução, sugerindo a ruptura da unidade binuclear em solução água/metanol 1:1. Foram observadas espécies mononucleares de  $m/z$  215, 276, 307 e 322.

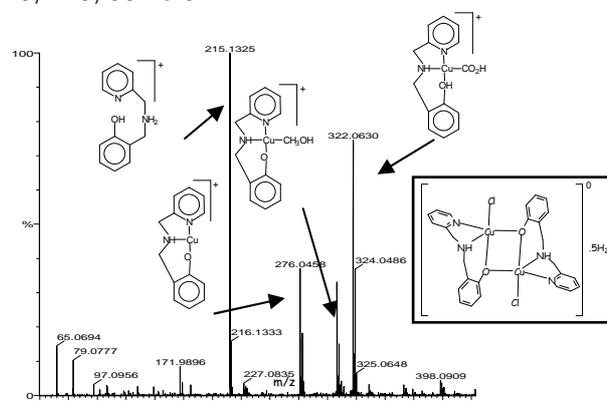


Figura 2. ESI(+)-MS/MS em solução de água:metanol (1:1) para o complexo  $[\text{Cu}_2(\text{BPA})_2\text{Cl}_2]$ .

Estudos eletroquímicos realizados para o complexo  $[\text{Cu}_2(\text{BPA})_2\text{Cl}_2]$  confirmaram a estrutura binuclear. São observados dois processos redox *quasi*-reversíveis atribuídos à redução e posterior oxidação de dois centros de cobre.

### Conclusões

Os resultados obtidos indicam a obtenção de um novo composto binuclear de cobre. Em virtude do pH do meio não ter sido adequado para a desprotonação da água, não foi observada a reação entre o composto e o  $\text{CO}_2$  atmosférico. Entretanto, o grupo fenol do ligante foi desprotonado, resultando na formação de um novo composto binuclear de cobre contendo pontes fenolato.

### Agradecimentos

CNPq, FAPERJ, UENF.

<sup>1</sup> Bull, E. S., Síntese e Caracterização e Avaliação das atividades de nuclease e antimutual de compostos de coordenação de cobre, *Dissertação de Mestrado*, Universidade Estadual do Norte Fluminense, Campos dos Goytacazes, 2008.