

Síntese e caracterização do complexo [Fe(BMIMAHIS)Cl₂]⁺

Marcus V. Guimarães¹ (PG), Tatiana L. Fernández¹ (PG), Carlos B. Pinheiro² (PQ), Marciela Scarpellini¹ (PQ)* marciela@iq.ufrj.br

¹Departamento de Química Inorgânica, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21945-970, RJ

²Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG

Palavras Chave: complexos de Fe(III), ligantes tripodais, branqueamento, raios X

Introdução

Os processos oxidativos empregados para branqueamento em indústrias têxteis, de papel e celulose e de detergentes consomem atualmente mais de 60 % da produção mundial de H₂O₂. Porém, por apresentar limitações relacionadas à cinética lenta e às altas temperaturas necessárias para um resultado eficiente, o emprego de catalisadores contendo metais de transição (inspirados em proteínas redox-ativas) tem-se mostrado uma alternativa promissora.¹ Neste trabalho, apresentamos a síntese e a caracterização do complexo [Fe(BMIMAHIS)Cl₂]⁺, **1**, com características potenciais para um novo catalisador, onde BMIMAHIS = 4-[bis(1-metilimidazol-2-il-metil)amino-etil]imidazol.

Resultados e Discussão

O complexo foi sintetizado a partir do ligante BMIMAHIS², FeCl₃ anidro e do NaClO₄ em metanol (Figura 1). Monocristais foram obtidos da solução mãe e analisados por IV, CHN, UV-Vis e cristalografia de raios X.

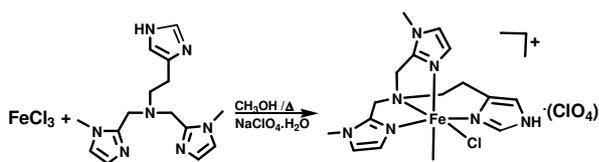


Fig. 1 - esquema reacional para obtenção de **1**

Análise elementar de CHN calculada para o complexo **1** (C₁₅H₂₁Cl₃FeN₇O₄): C, 34,27; H, 4,04; N, 18,66 %; Encontrada: C, 34,18; H, 4,18; N, 18,37 %;

O espectro vibracional do complexo **1** foi registrado em KBr e apresenta bandas típicas do ligante BMIMAHIS com pequenos deslocamentos evidenciando a coordenação ao centro metálico. ν (NH), 3139; ν (CH_{Ar}/CH_{Alif}), 3084-2872, ν (C=N/C=C), 1607-1442, ν (ClO), 1102; δ (CH_{Ar}), 760 em cm⁻¹.³

O comportamento do complexo **1** em solução foi analisado por condutividade molar, apresentando um valor de 159,8 $\Omega^{-1}\text{cm}^2\text{mol}^{-1}$, que caracteriza uma relação de eletrólito de 2:1, evidenciando a

liberação de um Cl⁻ da esfera de coordenação do centro metálico.

O espectro eletrônico do complexo **1**, registrado em solução metanólica, apresenta bandas nas regiões de 270 nm ($\epsilon \cong 14443 \text{ mol}^{-1}\cdot\text{L}\cdot\text{cm}^{-1}$) e 340 nm ($\epsilon \cong 15100 \text{ mol}^{-1}\cdot\text{L}\cdot\text{cm}^{-1}$), cujas absortividades molares evidenciam transições de transferência de carga, sendo a primeira transição intraligante e a em menor energia uma transferência de carga do tipo ligante metal [Cl \rightarrow Fe(III)].

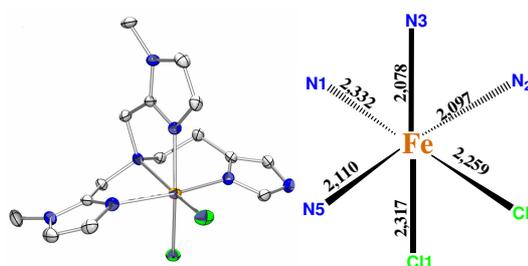


Figura 1. Estrutura e principais distâncias de ligação para o complexo **1**

Conclusões

O uso do ligante tripodal BMIMAHIS possibilitou a formação de um complexo de Fe^{III} estável, cujas caracterizações revelam ter propriedades adequadas ao emprego como catalisadores para branqueamento, uma vez que apresenta 2 sítios de coordenação lábeis, que são ideais para a interação com o substrato. Este complexo é similar ao obtido com o ligante BMIMAPY, no qual um imidazol é substituído por uma piridina.⁴ As comparações entre os dois sistemas serão apresentadas.

Agradecimentos

Os autores agradecem à Capes, Faperj, PPGQU/IQ/UFRJ e LDRX-UFF.

¹Hage, R. *et al. Angew. Chem. Int. Ed.*, **2006**, *45*, 206-222.

²Higa, T. *et al. Inorg. Chem. Acta* **2007**, *360*, 3304

³Nakamoto, K., *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, 3^a Ed. NY: John Wiley & Sons, Inc. 1977, part III, p. 231-232, 242.

⁴Farias, F.R. *et al.*, 31^a Reunião Anual SBQ, **2008**, QI-030.