

Complexos de Cu(II) derivados dos ligantes bis(4,6-dimetilpirimidin-2iltio)metano e bis(pirimidin-2iltio)metano

Márcia C. de Souza^{1*} (PG), Lílian Berlini² (IC), Ricardo S. Mota² (IC), José Roberto da S. Maia² (PQ) e Renata Diniz¹ (PQ)

* marciaphn@gmail.com

¹Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular (NEEM), departamento de química, ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora – MG, 36036-330.

²Departamento de Química, CCET, Universidade Federal de Viçosa.

Palavras Chave: estrutura cristalina, derivados da pirimidina.

Introdução

Derivados da pirimidina são compostos com grande atividade biológica, principalmente atividade antifúngica. Esta grande atividade biológica está relacionada com sua habilidade quelante frente a íons metálicos. Apesar da importância biológica dessa classe de moléculas, elas também são muito interessantes em química de coordenação, devido a possibilidade de formação de ligantes multifuncionais.¹

Neste trabalho reportamos a estrutura cristalina de dois complexos de Cu(II) derivados dos ligantes bis(4,6-dimetilpirimidin-2iltio)metano **(1)** e bis(pirimidin-2iltio)metano **(2)**.

Resultados e Discussão

Os compostos **(1)** e **(2)** foram sintetizados a partir da reação entre CuCl₂·2H₂O e os seus respectivos ligantes. Em ambos os casos um sólido verde foi obtido, filtrado e da água-mãe foram recolhidos cristais verdes aptos à análise por difração de raios X de monocristal. Esta análise foi realizada em um difratômetro Oxford GEMINI A- Ultra com detector CCD utilizando radiação KaMo ($\lambda = 0,71073 \text{ \AA}$) em temperatura ambiente. O refinamento da estrutura foi feito utilizando-se os programas XPREP, XS e XL.²

O composto **(1)** cristalizou-se no sistema monoclinico e grupo espacial P2₁/n, com a=10,611(2) Å, b=11,702(2) Å, c= 11,935(2) Å, $\beta=113,84(3)^\circ$ e V = 1355,4(5) Å³. O composto **(2)** cristalizou-se no sistema monoclinico e grupo espacial P2₁/c, com a=16,942(3) Å, b=13,671(3) Å, c= 7,815(2) Å, $\beta=100,45(3)^\circ$ e V = 1780,1(6) Å³.

O refinamento final de 164 parâmetros utilizando 2821 reflexões independentes [$F_o > 4\sigma(F_o)$] apresentou R=0,029, WR=0,085 e S=1,08 para **(1)** e utilizando 206 parâmetros e 2961 reflexões [$F_o > 4\sigma(F_o)$] apresentou R=0,044, WR=0,138 e S=1,11 para o composto **(2)**.

Através da Figura 1(a), verifica-se que o átomo de Cu1 está coordenado a três átomos de cloro e dois de nitrogênio do anel pirimidínico. O índice de trigonalidade ($\tau=0,11$) sugere que a geometria do Cu é pirâmide de base quadrada distorcida.

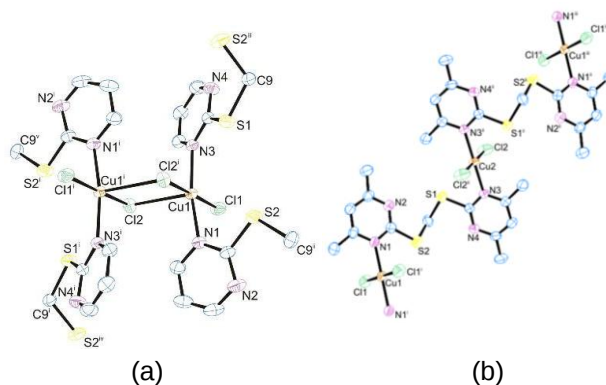


Figura 1. Estruturas cristalinas de (a) **(1)** e (b) **(2)**. Códigos de simetria: **(1)**: (i) 1- x, 1- y, - z; (ii) 1/2 + x, 1/2 - y, 1/2 + z; (iii) -1/2 + x, 1/2 - y, -1/2 + z; (iv) 1.5 - x, 1/2 + y, 1/2 - z; (v) 1/2 - x, 1/2 + y, -1/2 - z. **(2)**: (i) 1-x, 1-y, -z; (ii) -x, 1-y, -z; (iii) -1 + x, y, z.

A figura 1(b) referente ao composto **(2)** ilustra o polímero de coordenação unidimensional que se estende ao longo do eixo cristalográfico a. Neste composto, a geometria dos átomos de Cu2 e Cu1 é quadrática plana, confirmada pelos ângulos de ligação entre Cl2-Cu2-Cl2ⁱⁱ, N3ⁱⁱ-Cu2-N3, N1-Cu1-N1ⁱ, Cl1-Cu1-Cl1ⁱ que são iguais a 180°.

Em ambos os complexos são observadas interações fracas entre os átomos de S e os sítios metálicos.

Conclusões

Os resultados obtidos comprovaram a formação de dois complexos de Cu(II). No composto **(1)** a geometria do Cu é pirâmide de base quadrada distorcida. O composto **(2)** é um polímero de coordenação que se estende em 1D ao longo do eixo a. A geometria dos átomos de Cu2 e Cu1 é quadrática plana.

Agradecimentos

FAPEMIG, CAPES, LabCri-UFGM.

¹ Berlini, L.; Souza, M. C.; Abreu, H. A.; Leitão, A. A.; Maia J. R. S.; Diniz, R.; Journal of Molecular Structure **2009**, 935, 123-128.

² G.M. Sheldrick, SHELXTL/PC, Structure Determination Software Programs, Siemens Analytical X-ray Instruments Inc, Madison, Wisconsin, USA, **1990**.