

Síntese e determinação da estrutura molecular e supramolecular do complexo bis-2,2'-hidroxibenzofenonato de cobre (II)

Iara M. Landre Rosa^{1*} (IC), Talita E. Souza¹ (IC), Carolina N. Boscari (TC), Antonio C. Doriguetto¹ (PQ). imlandre@yahoo.com.br

¹ Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL-MG), Alfenas-MG

Palavras Chave: *hidroxibenzofenona, química supramolecular, difração de raios X, estrutura cristalina*

Introdução

Complexos metálicos têm sido utilizados em medicina no tratamento de muitas doenças, tais como câncer e artrite.¹ Os complexos de Cobre (II), em particular, possuem extrema importância nesta área devido a sua atividade citotóxica e antioxidante.² Sendo assim, é necessário que se determine a estrutura molecular e supramolecular de tais compostos, uma vez que as propriedades de uma substância nunca são completamente conhecidas até sua estrutura ser determinada. Neste trabalho reportamos a estrutura cristalina do complexo bis-2,2'-hidroxibenzofenonato de cobre (II).

Resultados e Discussão

O complexo bis-2,2'-hidroxibenzofenonato de cobre (II) foi sintetizado tendo como reagentes $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (0,125mmol) e 2,2'-diidroxibenzofenona (0,25 mmol) em meio metanólico sob constante agitação. O composto foi caracterizado por análise espectrofotométrica e calorimetria exploratória diferencial (DSC) confirmando a obtenção do complexo 2:1 (ligante:metal). Cristais marrons de hábito prismático foram obtidos a partir da evaporação lenta do solvente. As análises de difração de raios X foram realizadas à temperatura ambiente utilizando o difratômetro Oxford-Diffraction GEMINI com radiação $\text{MoK}\alpha$ ($\lambda = 0,71073 \text{ \AA}$). As estruturas foram resolvidas utilizando métodos diretos e refinadas por meio de mínimos quadrados de matriz completa. Os principais parâmetros cristalográficos são: grupo espacial C2/c , monoclinico, $a = 18,695(1) \text{ \AA}$, $b = 5,7548(3) \text{ \AA}$, $c = 19,920(1) \text{ \AA}$ e $\beta = 114,209(7)^\circ$, $V = 1954,6(2) \text{ \AA}^3$, e $\sigma = 1,779 \text{ Mg/m}^3$, $R1 = 0,0770$, $wR2 = 0,2257$. A representação Ortep do complexo é mostrada na Figura 1. A análise da estrutura molecular apontou que o complexo formado tem geometria quadrado planar com o átomo de Cu no plano dos oxigênios, uma vez que o átomo de Cu está presente no centro de inversão da estrutura. A análise da estrutura intramolecular foi realizada com o auxílio do software MOGUL³. Essa análise mostrou que todos os comprimentos e ângulos de ligação estão de acordo com os valores esperados para um bom refinamento cristalográfico e não desviam da média

encontrada para fragmentos semelhantes de moléculas depositadas no CSD⁴. Já o ângulo de torção envolvendo os dois anéis aromáticos são de $70,1^\circ$ o qual difere daquele observado para a estrutura determinada do ligante isolado⁵ que é de $45,7^\circ$. A estrutura supramolecular é estabilizada por uma ligação de hidrogênio clássica entre o grupo hidroxila (O3-H) e o oxigênio desprotonado (O2) coordenado ao metal. Essas ligações estabilizam o empacotamento ao longo das direções [101] e [010] e, conseqüentemente, gera uma rede de ligações de hidrogênio 2D paralelas ao plano (-101).

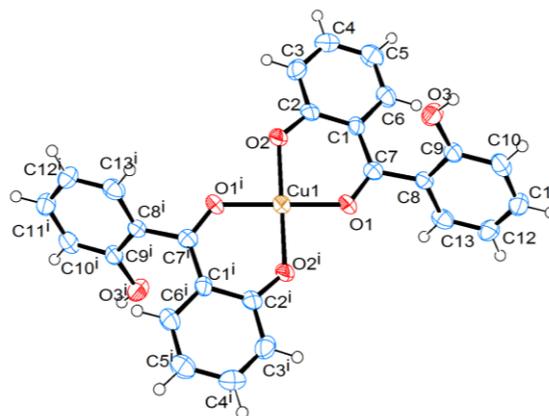


Figura 1. Representação Ortep do complexo bis-2,2'-hidroxibenzofenonato de cobre (II).

Conclusões

Foi sintetizada e determinada a estrutura do complexo bis-2,2'-hidroxibenzofenonato de cobre (II). Suas geometrias intra e intermoleculares foram estudadas e comparadas em termos de efeitos estéricos, indutivos e supramoleculares.

Agradecimentos

CNPq, PIBIC/CNPq-Unifal-MG, FAPEMIG, CAPES FINPEP pelo apoio financeiro e o LabCri (UFMG) pelas medidas de DRX.

¹ KALINOWSKA-LIS, U.; SZMIGIERO, L.; STUDZIAN, K.; OCHOCKI, J. *European Journal of Medicinal Chemistry* (2009) 44, 660-664..

² DÍAZ, A. M.; VILLALONGA, R.; CAO, R. *Journal of Coordination Chemistry* (2009) 62, 100-107.

³ SHELDRICK, G. M. *SHELXS-97. Program for Crystal Structure Resolution*. Univ. of Göttingen: Göttingen, Germany, 1997.

⁴ ALLEN, F. H. *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci.* (2002) 58, 380.

⁵ SCHLEMPER, E. O. *Acta Crystallographica B* (1982) 38, 1619-1622.