

Estudo cristalográfico da coordenação da lausona a íons metálicos de transição

Francisco L. S. Bustamante (PG)^{1*}, Marcos M. P. Silva (PG)¹, Jackson A. L. C. Resende (PQ)¹,
Mauricio Lanznaster (PQ)¹ (*chicolucio@gmail.com*)

¹ Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Al. Barros Terra S/N, CEP 24020-150, Centro, Niterói, RJ.

Palavras Chave: lausona, 2-hidroxi-1,4-naftoquinona, compostos de coordenação.

Introdução

O fato de as quinonas serem ligantes eletroativos tem despertado interesse por sua química de coordenação. Alguns complexos têm apresentado a ocorrência de *spin crossover* e também tautomerismo de valência.^{1,2} Compostos com estas propriedades são candidatos à construção de *displays* moleculares e dispositivos de memória. No campo medicinal, estudos indicam que a coordenação a centros metálicos pode melhorar a atividade biológica das quinonas.³ Neste trabalho são apresentados complexos de cobalto, ferro, manganês, níquel e zinco contendo a 2-hidroxi-1,4-naftoquinona (lausona, HL) e dados estruturais destes compostos mostrando três diferentes formas de coordenação da lausona.

Resultados e Discussão

Os complexos foram sintetizados a partir da reação entre lausona (HL, 1,0 mmol), trietilamina (1,0 mmol) e os sais $\text{Co}(\text{OAc})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, $\text{Mn}(\text{OAc})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{Ni}(\text{OAc})_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ou $\text{Zn}(\text{OAc})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (0,5 mmol), respectivamente, em mistura água/metanol. Foram obtidos os compostos *trans*- $[\text{Co}(\text{L})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ (**1**), *trans*- $[\text{Fe}(\text{L})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ (**2**), $[\text{Mn}(\text{L})_2]_n$ (**3**), *trans*- $[\text{Ni}(\text{L})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ (**4**), *trans*- $[\text{Zn}(\text{L})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ (**5**), e *cis*- $[\text{Zn}(\text{L})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ (**6**). Monocristais adequados para análise por difração de raios X foram obtidos para **1**, **3**, **5** e **6**. Dados cristalográficos mostram uma estrutura composta por duas lausonas desprotonadas coordenadas no plano equatorial e duas moléculas de água nas posições axiais para **1** e **5** (Figura 1). O complexo **6** contém duas moléculas de água coordenadas em posição *cis*. Todas as estruturas se apresentam como octaedros distorcidos.



Figura 1. (a) complexo **1**, (b) complexo **6**

A conformação *cis* de **6** é inédita da literatura de complexos com ligantes naftoquinônicos. A Figura 2 mostra a estrutura obtida para **3**. Trata-se de um polímero de coordenação onde a lausona atua como ligante tridentado. Há apenas um trabalho na

literatura com uma estrutura análoga de um polímero de lapachol com manganês.⁴

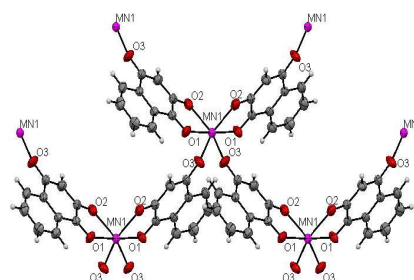


Figura 2. Estrutura polimérica de **3**

A comparação dos padrões de difração de policristais (Figura 3) de **1**, **2** e **4** permite, juntamente com dados espectroscópicos, inferir que os compostos sejam isoestruturais. A conformação *trans* é frequentemente encontrada na literatura para ligantes naftoquinônicos.⁵

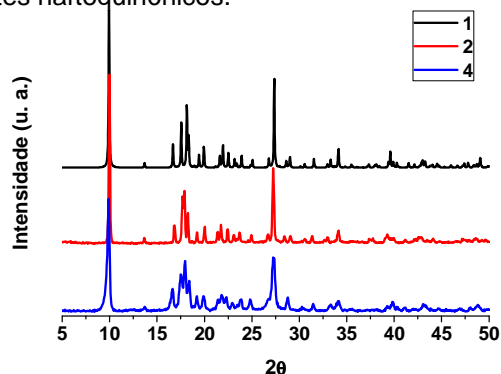


Figura 3. Sobreposição dos padrões de difração de **1**, **2**, e **4**

Conclusões

Foram obtidos seis complexos com o ligante lausona, sendo observadas três diferentes conformações. A conformação *cis* do complexo **6** é inédita na literatura. A estrutura polimérica de **3** é similar àquela previamente descrita para o ligante lapachol. Estudos cristalográficos com variação de temperatura se encontram em andamento para verificar se há mudança significativa na densidade eletrônica ao redor do centro metálico que possa indicar transferência de elétron metal-ligante.

Agradecimentos

À FAPERJ, ao CNPq e ao LDRX/UFF

¹ Chaudhuri, P. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, 123, 2213.

² Shultz, D. A. *Valence Tautomerism in Dioxolene complexes of Cobalt*, in *Magnetism: Molecules to Materials*, **2002**.

³ Vargas, M. D. et al. *J. Braz. Chem. Soc.* **2010**, 21, 1293.

⁴ Caruso, F. et al. *Inorg. Chem.* **2009**, 48, 3529.

⁵ Martinez, M. A. et al. *J. Coord. Chem.* **2003**, 56, 803.