

Estudo e Análise Estrutural de Complexos de Cobre(II) com Hidrazonas Polidentadas

Bárbara F. L. Viana^{1*} (PG), Claudia C. Gatto¹ (PQ)
*e-mail: babucha85viana@gmail.com

¹Laboratório de Síntese Inorgânica e Cristalografia – Instituto de Química – Universidade de Brasília, Brasília/DF

Palavras Chave: Complexos de Cobre(II), Hidrazonas, Cristalografia.

Introdução

As hidrazonas possuem grande potencial coordenativo e tem atraído muito a atenção dos Químicos Inorgânicos para o estudo da formação de complexos com íons de metais de transição. Essas Bases de Schiff possuem potencial antitumoral, antiviral e antifúngica já descrito.¹

O cobre é um elemento traço essencial à vida, a importância da sua atividade é descrita nas oxidases multi-cobre, tornando-se um sítio metálico bastante investigado também na Química Bioinorgânica.²

Resultados e Discussão

Este trabalho relata a síntese e caracterização de um complexo de cobre(II) coordenado a um ligante polidentado de interesse bioinorgânico derivado da 2,6-diacetilpiridina. O complexo $[\{Cu(dapbz)_2\}_2] \cdot 2DMF$ foi sintetizado a partir da reação equimolar entre 2,6-diacetilpiridina-benzoilhidrazona (H_2dapbz) e CuF_2 . Monocristais marrons ideais para a análise de difração de raios X são obtidos da recristalização em dimetilformamida.

A análise estrutural do complexo revela um sistema cristalino ortorrômbico, grupo espacial $Pna2_1$, sendo as constantes de cela: $a = 17,688(1) \text{ \AA}$, $b = 19,640(2) \text{ \AA}$, $c = 14,541(1) \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $Z = 4$ e $R1 = 0,0446$, $wR2 = 0,0720$. A coleta de dados por difração de raios X foi obtida em um difratômetro Bruker CCD Smart APEXII.

A representação da estrutura cristalina e molecular do complexo, na forma de um dímero, pode ser observada na Figura 1. Cada centro metálico apresenta um poliedro de coordenação na forma de uma pirâmide de base quadrada coordenando-se a cinco sítios de coordenação: dois átomos de nitrogênio e um átomo de oxigênio de uma molécula de (dapbz) e a um átomo de oxigênio e um de átomo de nitrogênio de uma segunda molécula do ligante.

Observa-se que a estrutura estudada é constituída por duas moléculas do ligante dapbz cada uma duplamente desprotonada e dois átomos de cobre(II) resultando em um complexo neutro. Outro aspecto relevante na estrutura é a ausência de interação Cu-Cu, pois estão suficientemente distantes, $3,250 \text{ \AA}$, valor maior do que o dobro do raio atômico do Cu ($1,35 \text{ \AA}$).

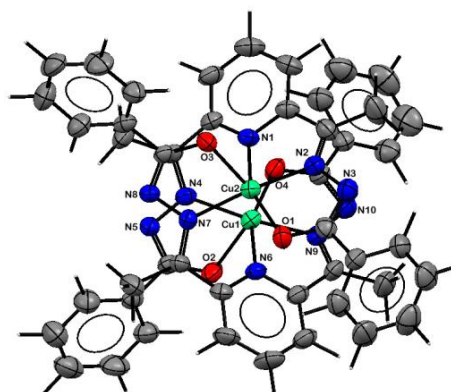


Figura 1. Projeção da estrutura de $[\{Cu(dapbz)_2\}_2]$. Por motivo de clareza foram omitidas as moléculas de DMF.

As estruturas foram calculadas via métodos diretos e os átomos hidrogenóides encontrados através do cálculo de sucessivas diferenças no mapa de Fourier, sendo o refinamento executado pelo método dos mínimos quadrados e para a solução e refinamento utilizou-se os programas SHELXS-97 e SHELXL-97.

Comparando-se os espectros de infravermelho do agente complexante com o do complexo obtido observa-se que as bandas $\nu(C=N)$ e $\nu(C=O)$ no complexo aparecem enfraquecidas e deslocadas de 1580 para 1552cm^{-1} e de 1661 para 1586cm^{-1} , respectivamente. A ausência da banda intensa em 3.400cm^{-1} no espectro do complexo caracterizando comprova a desprotonação do ligante.

Conclusões

A análise estrutural de novos complexos é de grande importância para o desenvolvimento científico-tecnológico, possibilitando estudos sobre a versatilidade quanto a forma de coordenação de hidrazonas com centros metálicos, propriedades físico-químicas dos complexos formados e posteriormente aplicações desses compostos bioativos em potencial.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPDF, FINATEC pelo apoio financeiro.

¹ Viñuelas-Zahinos, E.; et al.; *Polyhedron* **2008**, *27*, 879.

² Bermejo, M.R.; et al.; *New J. Chem.* **2003**, *27*, 1753.