

Novo Complexo de Cobre(II) com Relevância Bioinorgânica

João Guilherme M. de Carvalho (IC)^{1*}, Bárbara F. L. Viana (PG)¹, Claudia C. Gatto (PQ)¹

*meta_joao@hotmail.com

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

Palavras Chave: Complexos de cobre(II), difração de raios X, hidrazonas.

Introdução

As propriedades quelantes e capacidade de coordenação das hidrazonas têm sido estudadas intensamente, visto que seus complexos metálicos podem gerar variadas estruturas. Esses possuem não somente atividade farmacológica, como também interessantes propriedades magnéticas.¹

Juntamente as hidrazonas, o cobre constitui complexos de potencial farmacológico, podendo atuar como fungicidas e antibactericidas.² O cobre apresenta também grande importância em sistemas vivos, participando de atividades celulares e enzimáticas. Devido a isso, seus compostos podem apresentar grande interesse bioquímico.

Resultados e Discussão

Este trabalho consiste na síntese e caracterização de um complexo de cobre(II) com hidrazona. O agente complexante foi preparado por meio da reação entre a 2,6-diacetilpiridina com isoniazida em etanol e água na proporção 2:1, respectivamente. O complexo $[\{Cu(dapish)\}_2] \cdot 6H_2O$ foi obtido por meio da reação entre CuF_2 e o pré-ligante polidentado 2,6-diacetilpiridinaisoniazona ($H_2dapish$).

Neste dímero de cobre(II) sintetizado, pode-se observar que duas moléculas do ligante atuam de forma pentadentada e duplamente desprotonada. Cada molécula do ligante está arranjada de uma forma intercalada, coordenando-se assim a dois átomos de Cu distintos. A projeção da estrutura molecular do complexo $[\{Cu(dapish)\}_2]$ encontra-se na Figura 1.

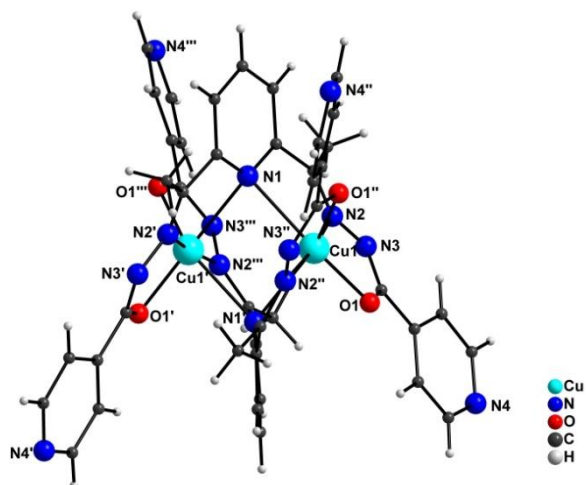


Figura 1. Projeção da estrutura molecular do complexo $[\{Cu(dapish)\}_2]$. As moléculas de água foram omitidas por motivo de clareza.

Os átomos de cobre apresentam número de coordenação seis e seus poliedros de coordenação encontram-se na forma de um octaedro distorcido, na medida em que os comprimentos das ligações são distintos. Essa distorção ocorre devido à geometria do ligante, que ordena posições relativas diferentes para os átomos de nitrogênio e oxigênio em relação aos átomos de cobre.

Cada centro metálico se encontra rodeado de átomos coordenantes provenientes das piridinas, grupos carbonila e grupos amina dos ligantes. Sendo que cada átomo de cobre está coordenado a três átomos ligantes de uma molécula de (dapish) e mais três átomos ligantes de uma segunda molécula de (dapish).

O complexo obtido cristaliza no sistema cristalino ortorrômbico e grupo espacial P_{bn} . As constantes da cela unitária do complexo são: $a = 14,186(1)\text{Å}$; $b = 15,399(0)\text{Å}$; $c = 13,923(3)\text{Å}$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $Z = 4$, $R_1 = 0,0639$ e $wR_2 = 0,1545$. Os dados da análise por difração de raios X foram obtidos em um difratômetro Bruker CCD Smart APEX II.

Os espectros de infravermelho do ligante e do complexo foram feitos com o intuito de verificar o comportamento das ligações envolvidas na complexação. As bandas $\nu(C=O)$ e $\nu(C=N)$ aparecem, no espectro do complexo, enfraquecidas e deslocadas para uma frequência menor, quando comparadas as bandas do agente complexante. A banda intensa em 3.400cm^{-1} está ausente no espectro do complexo caracterizando assim a desprotonação do ligante.

Conclusões

A síntese e caracterização estrutural do novo dímero de cobre(II) contribui não só para compreensão da química de coordenação deste elemento, como também para futuros estudos bioinorgânicos.

A afinidade do cobre com bases de Schiff que apresentam sítios de coordenação duros e as diferentes formas de coordenação possíveis nos complexos continuarão a ser exploradas, tentando potencializar sua atividade biológica.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPDF, FINATEC pelo apoio financeiro.

¹ Bermejo, M.R.; et. al., *New. J. Chem.* **2003**, *27*, 1753.

² Vinod, P.S.; Parul, G.; *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, **2008**, *23*, 797.