

Síntese e Análise Estrutural de um Novo Complexo de Cobre(II) Envolvendo Ligantes Dicianamida e Mercaptotiazolina.

Maria Ap. B. Santos^{1*} (IC), Claudia C. Gatto² (PQ), Lincoln L. Romualdo¹ (PQ)

¹ Universidade Federal de Goiás – Campus Avançado Catalão (UFG-CAC),

² Instituto de Química – Universidade de Brasília (UnB)

* maria.bez@ig.com.br

Palavras Chave: dicianamida, mercaptotiazolina, íons pseudohaletos.

Introdução

Pseudohaletos são uma classe de ligantes que apresentam elétrons π deslocalizados, envolvendo geralmente átomos de nitrogênio. A dicianamida (dca) $\{N(CN)_2\}^-$, íon pseudohaletos, pode apresentar-se em diferentes modos de coordenação, como ligante monodentado ou em ponte, através de um ou mais átomos de N, sendo, portanto, crescente o interesse no estudo de complexos com este ligante, para a formação de polímeros de coordenação.¹

O ligante 2-mercaptotiazolina (mctz-H), do tipo tiona heterocíclica, também apresenta uma variedade de modos de coordenação devido possuir em sua estrutura, além do átomo de nitrogênio, o átomo de enxofre. Para este último, as principais propriedades são a formação de filmes finos e aplicações biológicas.² Este trabalho teve por objetivo sintetizar e caracterizar estruturalmente complexos de cobre(II) e assim estudar os modos de coordenação dos ligantes aniônicos (dca)⁻ e (mctz-H), com metais de transição.

Resultados e Discussão

A dicianamida de cobre $Cu(dca)_2$ foi preparada reagindo-se as soluções aquosas de $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ e $Na[N(CN)_2]$. Obteve-se o complexo na forma de um precipitado cristalino verde, formato de agulhas.

Para a preparação do composto de coordenação $[Cu(dca)_2(mctz-H)_2]$, reagiu-se por 24h e sob agitação, $Cu(dca)_2$ e 2-mercaptotiazolina, em 5 mL de MeCN, obtendo-se um precipitado amarelo. Realizou-se a caracterização por espectroscopias na região do infravermelho e UV-visível, ponto de fusão e condutividade. Os espectros adquiridos na região do infravermelho (IV) apresentam bandas características referentes ao $\nu_{sim} C\equiv N$ ³ (Tabela 1), indicando a coordenação do ligante (dca)⁻ ao metal pela variação do número de onda do sal $Na(dca)$, $Cu(dca)_2$ e $Cu(dca)_2(mctz-H)_2$.

Tabela 1. Variação dos $\nu_{sim} C\equiv N$ na região do infravermelho em cm^{-1} .

Composto	$\nu C\equiv N$	$\nu C\equiv N$
Na(dca)	2178	2226
$Cu(dca)_2$	2208	2293
$Cu(dca)_2(mctz-H)_2$	2178	2329

Para a espectroscopia na região do UV-visível observou-se uma banda de absorção na região do visível, 665,5 nm, e outra na região do infravermelho, 778,4 nm, referentes às transições d-d no metal.

Medidas de condutividade em DMSO mostraram que o composto comporta-se como um eletrólito 1:1, apresentando um valor de condutividade de $24 \text{ ohm}^{-1} \text{ cm}^2 \text{ mol}^{-1}$ indicando que um ligante (dca)⁻ não está coordenado ao íon metálico.

Conclusões

Através das análises realizadas observou-se a formação do complexo de cobre(II) coordenado a um ligante e um íon pseudohaletos. Foram feitos testes de solubilidade e diferentes formas de cristalização estão sendo testadas para a obtenção de monocristais ideais para a realização da análise de difração de raios X e assim obtermos a elucidação da estrutura cristalina para avaliação dos modos de coordenação.

Agradecimentos

Agrademos aos Professores Karl E. Bessler e Sebastião de Sousa Lemos do Instituto de Química da UnB pela concessão de solventes e reagentes para início deste trabalho.

¹ Bessler, K. E.; Romualdo, L. L.; Deflon, V. M.; de Souza Lopes, C.C.; *Zeitschrift Fur Naturforschung Section B – A Journal of Chemical Sciences.*, 2006, 60, 33-36.

² Kadoma, Y.; Kumada, W.; Asai, Y.; Sugita, Y.; Yokoe, I.; Fujisawa, S.; *Molecules* 2007, 12, 1836-1844

³ Nakamoto K.: *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination compounds*. Wiley; New York, 1997.