

# Um novo complexo de Co(III) com ligante 3,5-di-*terc*-butilcatecol

Ana C. P. Morais (IC)<sup>1\*</sup>, Francisco L. S. Bustamante (PG)<sup>1</sup>, Mauricio Lanznaster (PQ)<sup>1</sup>  
(carolprecioso@gmail.com)

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

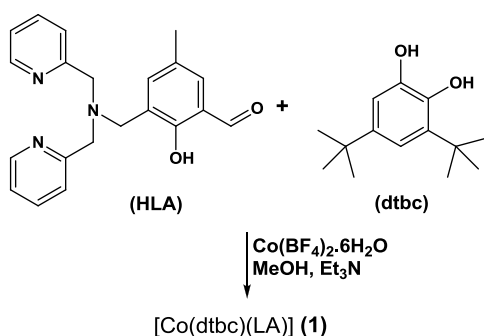
Palavras Chave: 3,5-di-*terc*-butilcatecol, cobalto, tautomerismo de valência

## Introdução

Complexos de metais de transição coordenados por ligantes do tipo quinona (Q) podem alternar os estados eletrônicos localizados dos ligantes entre as formas de semiquinona (SQ) e catecolato (Cat). O equilíbrio tautomérico de valência ( $R-D^+ \leftrightarrow R^+-D$ ; R = receptor, D = doador) entre complexos de  $M^I$  (spin alto) e  $M^{II}$  (spin baixo), onde  $M = Co, Mn$ , com ligantes do tipo catecolato e/ou do semiquinonato, pode ser térmica, mecânica ou foto induzido.<sup>1</sup> Compostos que apresentam esse tipo de comportamento têm possíveis aplicações na construção de dispositivos eletrônicos e *displays* moleculares. Neste trabalho são apresentados a síntese e a caracterização preliminar um novo complexo de cobalto com o ligante 3,5-di-*terc*-butilcatecol (dtbc).

## Resultados e Discussão

O complexo  $[Co(dtbc)(LA)]$  (1) foi sintetizado através da reação entre  $Co(BF_4)_2 \cdot 6H_2O$  (0,5 mmol), dtbc (0,5 mmol), HLA<sup>2</sup> (0,5 mmol) e trietilamina (1,5 mmol) em metanol, sob agitação à temperatura ambiente. Obteve-se um precipitado marrom claro.



A presença dos dois ligantes coordenados ao cobalto foi evidenciada pela presença de bandas características de ambos no espectro infravermelho do complexo, que também indicou ausência do contra-íon  $BF_4^-$ .

No espectro eletrônico de 1 (Figura 1) são observadas duas bandas em 307 e 394 nm, que podem ser atribuídas às transições  $\pi-\pi^*$  e  $n-\pi^*$  dos anéis aromáticos dos ligantes  $LA^-$  e  $dtbc^-$  coordenados, e à presença de processos de transferência de carga do tipo ligante-metal.

O voltamograma cíclico (CV) de 1 (Figura 2) mostra a presença de três processos *quasi*-reversíveis com  $E_{1/2} = -1,28$  V,  $-0,30$  V e  $0,14$  V vs  $Fc/Fc^+$  atribuídos, respectivamente, aos pares redox  $Co^{III}/Co^{II}$ ,  $dtbc^{2-}/dtbsq^-$  e  $dtbsq^-/dtbq$ .

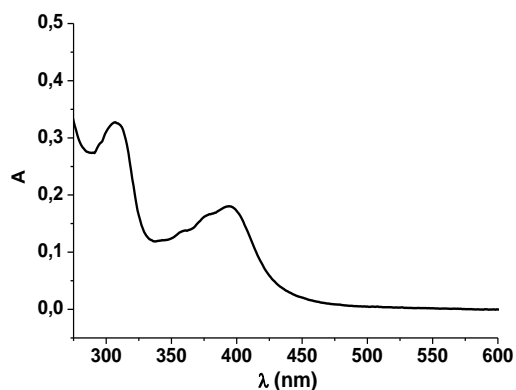


Figura 1: Espectro UV-vis de 1 em acetonitrila.

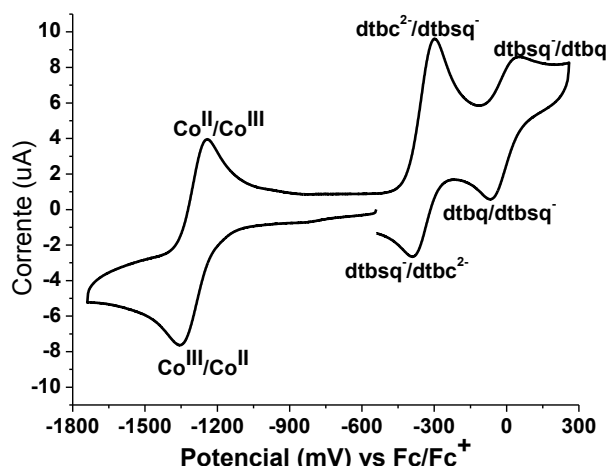


Figura 2: CV de 1 em DMSO/TBAClO<sub>4</sub> a 0,1 V/s (trab.:C, ref: Ag/AgCl, aux.: Pt, ref.interna: Fc/Fc<sup>+</sup>).

## Conclusões

A reação do ligante HLA e dtbc com o íon  $Co^{2+}$  produziu um sólido de coloração marrom clara, que foi caracterizado por espectroscopias IV, UV-Vis e por voltametria cíclica. Os resultados obtidos sugerem a presença de um íon  $Co^{3+}$  coordenado a um ligante HLA e um dtbc, ambos na forma desprotonada. A obtenção de monocristais para análise por difração de raios X e microanálise estão em andamento para confirmação da composição e estrutura molecular de 1.

## Agradecimentos

À CAPES, CNPq e FAPERJ pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> David A. Shultz (2002). *Valence Tautomerism in Dioxolene Complexes of Cobalt*, in Magnetism: Molecules to Materials II: Molecule-Based Materials. Joel S. Miller and Marc Drillon Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, e referências citadas.

<sup>2</sup> Karsten. P.; Neves, A.; Bortoluzi, A. J. e Lanznaster, M. *Inorganic Chemistry*. **2002**, 41, 4624