

## Síntese e caracterização físico-química de novos compostos de coordenação de ferro contendo grupos cumarínicos

Samila R. Morcelli <sup>1</sup>(PG)\*, Christiane Fernandes <sup>1</sup>(PQ), Adolfo Horn Jr <sup>1</sup>(PQ), David H. Russel<sup>2</sup> samilamorcelli@yahoo.com.br\*

<sup>1</sup>LCQUI – UENF – Campos/RJ <sup>2</sup>Texas A&M University, College Station, TX, US

Palavras Chave: mononuclear, ferro, grupos cumarínico, ESI-MS/MS.

### Introdução

Tem sido observada na literatura crescente utilização de ligantes contendo grupos derivados da cumarina na obtenção de compostos de coordenação contendo diversos metais.<sup>1,2</sup> O interesse se justifica pelas diversas propriedades atribuídas às cumarinas.<sup>3</sup> Neste sentido, no presente trabalho são apresentados os resultados de síntese e caracterização de novos compostos de coordenação de ferro (III) contendo ligantes os quais possuem os grupos 4 e 7-hidroxycumarinas.

### Resultados e Discussão

Os ligantes **L1-L4** foram sintetizados e caracterizados por <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C NMR. Os compostos de coordenação foram obtidos através da reação entre os respectivos ligantes e FeCl<sub>3</sub>.6H<sub>2</sub>O, em metanol, sob refluxo. Os compostos foram caracterizados por espectroscopias de infravermelho e eletrônica, análise elementar (C,H,N) condutividade, voltametria cíclica, ESI(+)-MS e ESI(+)-MS/MS.

Resultados de caracterização - Complexos **C1-C4**:

**Complexo C1:** Sólido amarelo-claro. Rendimento: 40%. Infravermelho (cm<sup>-1</sup>): 3059 (ν CH aromático), 2947 (ν CH), 1693, 1620, 1604, 1562, 1481, 1444 (ν C=C e ν C=N), 775, 651 (γ-CH piridina e β-anel); Ponto de fusão: 202°C; Análise elementar: C= 46,82% (46,90%), H= 4,42% (4,38%), N= 6,82% (6,70%), sendo que os dados experimentais são apresentados entre parênteses. Fórmula: FeC<sub>24</sub>H<sub>27</sub>Cl<sub>3</sub>N<sub>3</sub>O<sub>6</sub> PM= 614,69g/mol; ESI(+)-MS: [Fe(L1-H)OH]<sup>+</sup> ou FeC<sub>24</sub>H<sub>23</sub>N<sub>3</sub>O<sub>5</sub> m/z 489.

**Complexo C2:** Sólido azul. Rendimento: 20%. Infravermelho (cm<sup>-1</sup>): 3066 (ν CH aromático), 2935 (ν CH), 1678, 1620, 1604, 1566, 1477, 1454 (ν C=C e ν C=N), 759, 632 (γ-CH piridina e β-anel); Ponto de fusão: > 350°C; Análise elementar: C= 51,34% (51,40%), H= 4,81% (4,45%), N= 4,61% (4,61%), sendo que os dados experimentais são apresentados entre parênteses. Fórmula: FeC<sub>26</sub>H<sub>29</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>7</sub> PM= 608,28g/mol; ESI(+)-MS: [Fe(L2)(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>.CH<sub>3</sub>O]<sup>+</sup> ou FeC<sub>26</sub>H<sub>30</sub>N<sub>2</sub>O<sub>8</sub> m/z 554.

**Complexo C3:** Sólido amarelo-escuro. Rendimento: 66%. Infravermelho (cm<sup>-1</sup>): 3086 (ν CH aromático), 2943 (ν CH), 1712, 1612, 1481, 1446, 1427 (ν C=C e ν C=N), 775, 651 (γ-CH piridina e β-anel); Ponto

de fusão: 176°C; Análise elementar: C= 48,23% (48,44%), H= 4,22% (4,39%), N= 7,03% (6,69%), sendo que os dados experimentais são apresentados entre parênteses. Fórmula: FeC<sub>24</sub>H<sub>25</sub>Cl<sub>3</sub>N<sub>3</sub>O<sub>5</sub> PM= 597,69g/mol; ESI(+)-MS: [Fe(L3-H)OH]<sup>+</sup> ou FeC<sub>24</sub>H<sub>23</sub>N<sub>3</sub>O<sub>5</sub> m/z 489.

**Complexo C4:** Sólido azul-escuro. Rendimento: 66%; Infravermelho (cm<sup>-1</sup>): 3028 (ν CH aromático), 2935, 2877 (ν CH), 1612, 1508, 1477, 1454 (ν C=C e ν C=N), 767, 617 (γ-CH piridina e β-anel), Ponto de fusão: 206°C; Análise elementar: C= 52,99% (52,79%), H= 4,62% (4,13%) e N= 4,75% (4,45%), sendo que os dados experimentais são apresentados entre parênteses. Fórmula: FeC<sub>26</sub>H<sub>29</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>7</sub> PM= 590,26g/mol; ESI(+)-MS: [Fe(L4)(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>.CH<sub>3</sub>O]<sup>+</sup> ou FeC<sub>26</sub>H<sub>30</sub>N<sub>2</sub>O<sub>8</sub> m/z 554.

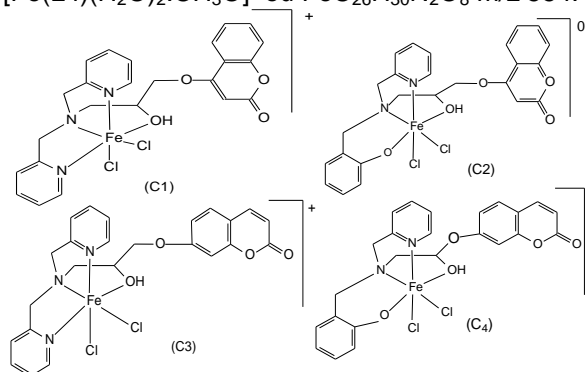


Figura 1. Proposta de estrutura para os complexos (C1-C4).

### Conclusões

As reações de complexação entre os ligantes **L1-L4** com FeCl<sub>3</sub>.6H<sub>2</sub>O resultaram em quatro novos complexos de coordenação de ferro (III). Os mesmos foram satisfatoriamente caracterizados, indicando a obtenção de complexos mononucleares contendo ligantes lábeis em suas esferas de coordenação.

### Agradecimentos

FAPERJ, CNPq, CAPES/PROCAD.

- 1 Kaliota, A.; Kresi, O.; Tzougraki, J. *Inorg. Biochem.* **2001**, 33.
- 2 Thati, B.; Noble, A.; Creaven, B. S.; Walsh, M.; McCann, M.; Kavanagh, K.; Devereux, M.; Egan, D. A. *Cancer Letters.* **2007**, 321.
- 3 Hoult, J. R. S.; Payá, M. *Gen. Pharmacol.* **1996**, 713.