

[Cu(BEPI-NO₂)Cl]: um Novo Complexo Mononuclear para Processos Oxidativos

Elizabeth T. Souza (PG)^a, Érica de M. Azevedo(IC)^a, Jackson L. Resende^b, Sérgio P. Machado(PQ)^a, Marciela Scarpellini (PQ)^a

^aLDCB - Laboratório de Desenvolvimento de Compostos Bioinorgânicos, Instituto de Química, UFRJ; CEP 21949-909, Rio de Janeiro, RJ. bethytx@iq.ufrj.br

^bLDRX- Laboratório de Difração de Raios X, Instituto de Química, UFF; CEP 24020-150, Niterói, RJ

Palavras Chave: complexo de cobre(II), processos oxidativos.

Introdução

Os processos de branqueamento estão entre os mais destacados processos oxidativos em todo o mundo. Prova disto é o largo emprego destes em uma variedade de indústrias, tais como têxteis, papel e celulose, e detergentes¹. Na verdade, os sistemas de branqueamento à base de cloro são bastante empregados, no entanto, as preocupações ambientais levaram à restrição do seu uso, baseado principalmente em seus subprodutos organoclorados, que são potencialmente perigosos e apresentam baixa biodegradabilidade. A fim de superar essas desvantagens, sistemas totalmente livres de cloro (TCF) surgiram como uma alternativa, dentre os quais estão o oxigênio molecular, o ozônio, o peróxido de hidrogênio, os perboratos, as enzimas e outros. Algumas estratégias estão sendo empregadas, tais como a utilização de enzimas capazes de ativar o oxigênio, ou peróxido de hidrogênio. Considerando o grande interesse acadêmico e industrial nestes sistemas enzimáticos, complexos modelo que mimetizam o ambiente de coordenação de metaloenzimas são considerados uma alternativa para o desenvolvimento de novos catalisadores.

Resultados e Discussão

O complexo **1** foi sintetizado a partir de quantidades equimolares de CuCl₂·2H₂O e do ligante³ HBEPI-NO₂ em acetona (Fig.1). Monocristais adequados à resolução da estrutura cristalina por difração de raios X foram obtidos da solução mãe.

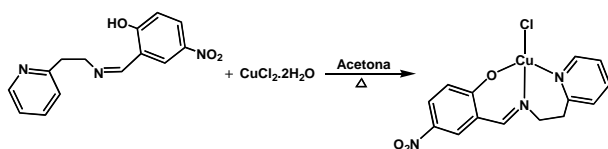


Figura 1. Esquema reacional para obtenção do complexo **1**.

Análise elementar de CHN calculada para o complexo **1** concorda com a fórmula C₁₄H₁₂ClCuN₃O₃: C, 45,54; H, 3,28; N, 11,38. Encontrada: C, 45,56; H, 3,01; N, 11,21 %. O espectro vibracional do complexo **1** foi registrado

34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

em KBr e apresenta bandas típicas do ligante BEPI-NO₂ com pequenos deslocamentos, evidenciando a coordenação ao centro metálico. IV (KBr) **HBEPI-NO₂**: [ν(OH)]: 3468 cm⁻¹; [ν(CH_{Ar}) / ν(CH_{Al})]: 3071-2890 cm⁻¹; [(C=N_{imina})]: 1665 cm⁻¹; [ν(NO)]: 1364 cm⁻¹ e 1541 cm⁻¹; [δ(OH)]: 1380 cm⁻¹; [ν(C=N_{pirid})/C=C_{ar}]: 1438-1588 cm⁻¹; [ν(CO)]: 1280-1180 cm⁻¹; [δ(CH_{Ar})]: 768 cm⁻¹. **Complexo 1**: [ν(CH_{Ar}) / ν(CH_{Al})]: 2804-3017 cm⁻¹; [(C=N_{imina})]: 1635 cm⁻¹, [ν(C=N_{pirid}) / C=C_{ar}]: 1443 - 1593 cm⁻¹; [ν(NO)]: 1366 cm⁻¹ e 1549 cm⁻¹; [δ(OH)]: 1409 cm⁻¹; [ν(CO)]: 1250 cm⁻¹; [δ(CH_{Ar})]: 770 cm⁻¹. **UV-Vis** (CH₃CN): λ_{max}/nm(ε / mol⁻¹ L cm⁻¹): 654 (73); 474 (ombro); 423 (6473); 368 (15400). O complexo **1** cristaliza na forma de monocristais verdes e apresenta uma estrutura mononuclear, onde o íon Cu(II) está coordenado a um ligante BEPI-NO₂⁻ e a um Cl⁻. O centro metálico está coordenado por um átomo de nitrogênio piridínico e um átomo de nitrogênio imínico, ocupando posições *cis* entre si, um átomo de oxigênio do fenóxido em posição *trans* ao nitrogênio piridínico e um átomo de cloro. A análise dos comprimentos e ângulos de ligação sugere que o complexo tem geometria de coordenação tetraédrica distorcida.

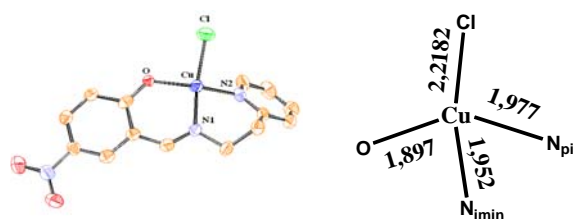


Figura 2: ORTEP^c e esquema das principais distâncias de ligação do complexo **1**.

Conclusões

O ligante HBEPI-NO₂ possibilitou a formação de um complexo mononuclear de Cu(II) estável com estrutura apropriada para o emprego como catalisador em processos oxidativos.

Agradecimentos

CAPES, FAPERJ, CNPq, PGQu e LDRX-UFF.

¹ Martins, L. R. *et al.* *J. Braz. Chem. Soc.* **2010**, *21*, 1218.

² Farrugia, L. J. *J. Appl. Crystallogr.* **1997**, *30*, 565.

³ Asadi, M. *et al.* *Inorg. Chim. Acta*, **2009**, *362*, 4096.