Síntese e caracterização do complexo bis(tricarbonil)bis[*N*-(2-hidroxinaftil)-β-alanina]dirênio(I).

Sérgio M. Soares[1] (PG)*, Sebastião S. Lemos[1] (PQ), Robert A. Burrow[2] (PQ).

[1]Instituto de Química, Universidade de Brasília, 70904-970 Brasília – DF, Brasil
[2]Universidade Federal de Santa Maria (UFMS), Santa Maria-RS, Brasil

macedos@unb.br

Palavras Chave: *Beta-aminoácidos, carbonila de rênio, bases de Schiff*

Introdução

Complexos de rênio(I) e tecnécio(I) contendo o fragmento $M(CO)_3^+$, são estáveis em meio aquoso, o que fazem desses uma interessante e nova classe de fármacos.[1]

Complexos de Re^{I} e Re^{V} com bases de Schiff tem sido sintetizados e caracterizados há mais de 30 anos restringindo-se a ligantes do tipo (hidroxi/mercaptofenilsalicildenoimina) sendo pouco relatados complexos desse metal com bases de Schiff derivadas de aminoácidos.[2]

Este trabalho tem por objetivo a síntese e caracterização de um complexo tricarbonílico de rênio com uma base de Schiff derivada da condensação da beta-alanina com o 2-hidroxinaftaldeído (*N*-(2-hidroxinaftil)-β-alanina).

Resultados e Discussão

A base de Schiff, *N*-(2-hidroxinaftil)-β-alanina (LH_2), foi sintetizada reagindo-se quantidades equimolares (1:1) de beta-alanina com o 2-hidroxinaftaldeido.

A síntese do complexo de rênio pode ser resumida em duas etapas:

Etapa 1:

$$[ReBr(CO)_5] + Ag(CF_3COO) \rightarrow [Re(CO)_5][CF_3COO]$$

Etapa 2:

$$[Re(CO)_5][CF_3COO] + LH_2 \rightarrow [Re(LH)(CO_3)] + CF_3COOH$$

Os produtos obtidos foram caracterizados por analise de ponto de fusão (P.F) espectroscopia de absorção na região do infravermelho (Tabela 1), microanálise (CHN), espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN de ^{1}H e ^{13}C) difração de raios X em monocristal (complexo).

Tabela 1. Dados das análises de absorção no infravermelho

Composto	C=N	$COO\nu_{ass}$	$COO\nu_{sim}$
LH_2	1643	1546	
$[Re(LH)(CO_3)]$	1619	1558,1507	1404

*Valores em cm^{-1}

A análise de difração de raios X revelou que o ligante (LH) atua como bidentado, como já era esperado, coordenando-se ao íon Re^{I} por meio do átomo do oxigênio fenólico e do nitrogênio imínico (Figura 1). A análise mostrou ainda que o complexo formado é dinuclear, onde cada íon Re^{I} está hexacoordenado. Sistema cristalino triclínico, grupo espacial $P2_1/c$, Z = 2, R_1 = 0,0390, wR_2 = 0,0925.

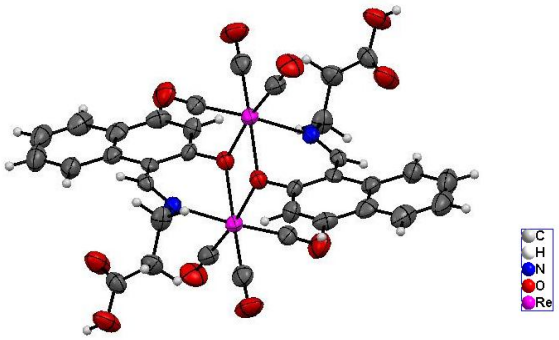

Figura 1. Projeção ORTEP da estrutura molecular do complexo **$[Re(LH)(CO_3)]$**. Elipsóide térmica com 50% de probabilidade. Re–C= 1.900 Å (valor médio), Re–N= 2.171(6), Re–$O_{fenol.}$= 2.189(5)

Conclusões

A estrutura molecular do complexo revelou que esse ligante atua como bidentado ($O_{fenol.}$, N) e que o mesmo apresenta uma forte tendência a formação de arranjos supramoleculares, interagindo com as outras unidades do complexo através do átomo de oxigênio da carboxila.

Agradecimentos

FINEP-CT INFRA 0970/01.

[1] Sakiyan, I.; Logoglu, E.; Arslan, S.; Sari, N.; Sakiyan, N. *BioMetals*. **2004**. *17*, 115.
[2] Chohan, Z. H.; Arif, M.; Akhtar, M. A.; Supuran, C. T. *Bioinorg. Chem. Appl*. 2006. ***2006***, 1.