

## Síntese, caracterização estrutural e espectroscópica de novos compostos de coordenação de cobalto contendo o grupo cumarínico

Samila R. Morcelli<sup>1</sup> (PG)\*, Christiane Fernandes<sup>1</sup> (PQ), Adolfo Horn Jr<sup>1</sup> (PQ), David H. Russell<sup>2</sup> (PQ), Marcetta Y. Darensbourg<sup>2</sup> (PQ)

\*samilamorcelli@yahoo.com.br

<sup>1</sup> Universidade Estadual do Norte Fluminense – Campos/RJ, <sup>2</sup> Texas A&M University, College Station, TX, US

Palavras Chave: Cobalto, ES(+)-MS, Raios-X.

### Introdução

As interessantes propriedades medicinais dos compostos de coordenação têm motivado a síntese e caracterização de novos compostos e subsequentes investigações biológicas<sup>1</sup>.

Sugere-se que as propriedades redox atribuídas aos íons metálicos presentes nestes compostos, com potenciais aplicações médicas, poderiam atuar de forma complementar às atividades já exibidas por vários compostos orgânicos<sup>2</sup>, como as cumarinas. Neste sentido, o presente trabalho relata os resultados de síntese e caracterização de novos compostos de coordenação de cobalto contendo ligantes os quais possuem o grupo 7-hidroxycumarina em suas estruturas.

### Resultados e Discussão

Os ligantes **L1** e **L2** foram sintetizados e caracterizados por <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C NMR<sup>3</sup>. Os compostos de coordenação foram obtidos através da reação entre os respectivos ligantes e CoCl<sub>2</sub>.6H<sub>2</sub>O, em metanol:isopropanol (1:2). O composto **C1** foi sintetizado sob refluxo brando e adicionou-se LiClO<sub>4</sub>. O composto **C2** foi sintetizado a temperatura ambiente. Os compostos foram caracterizados por espectroscopias de infravermelho e eletrônica, análise elementar (C,H,N), condutividade, ponto de fusão, difração de raios-X de monocristal, ESI(+)-MS e ESI(+)-MS/MS.

Principais resultados de caracterização - Complexos **C1** e **C2**:

**C1**: Raios-X. Principais comprimentos de ligação: Co1-Cl1 = 2,340(2); Co1-O4 = 2,124(3); Co1-O5 = 2,147(4); Co1-N1 = 2,091(4); Co1-N2 = 2,168(5); Co1-N3 = 2,118(4). Análise elementar: C= 46,67% (46,62%), H= 4,23% (4,36%), N= 6,53% (6,48%), sendo que os dados experimentais são apresentados entre parênteses. Fórmula: CoC<sub>25</sub>H<sub>27</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>3</sub>O<sub>9</sub> PM= 643,34g/mol; ESI(+)-MS: [Co(L1)ClO<sub>4</sub>]<sup>+</sup> ou CoC<sub>24</sub>H<sub>23</sub>N<sub>3</sub>O<sub>8</sub>Cl (m/z 575), [Co(L1)Cl]<sup>+</sup> ou CoC<sub>24</sub>H<sub>23</sub>N<sub>3</sub>O<sub>4</sub>Cl (m/z 511), [Co(L1-H)]<sup>+</sup> ou CoC<sub>24</sub>H<sub>22</sub>N<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (m/z 475).

**C2**: Raios-X. Principais comprimentos de ligação: Co2-Cl3 = 2,300(3); Co2-O3 = 1,956(5); Co2-O5 = 2,035(3); Co2-N2 = 2,178(6); Co2-N28 = 2,083(7). Análise elementar: C= 51,78% (51,84%), H= 5,04% (5,15%), N= 4,83% (4,79%), sendo que os dados experimentais são apresentados entre parênteses. Fórmula: CoC<sub>25</sub>H<sub>29</sub>ClN<sub>2</sub>O<sub>8</sub> PM= 579,90g/mol; ESI(+)-MS: [Co(L2-H)]<sup>+</sup> ou CoC<sub>24</sub>H<sub>17</sub>N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> m/z 490.

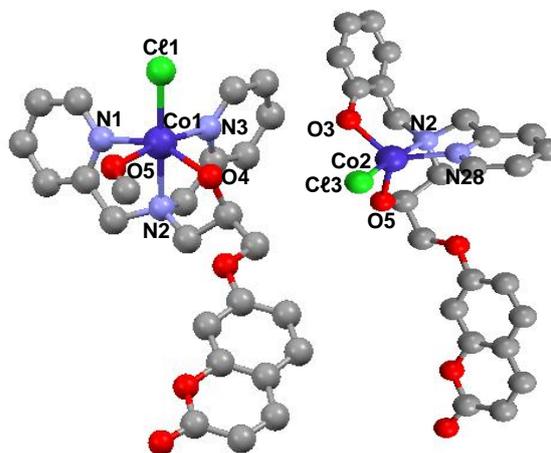


Figura 1. Estrutura de raios-X para os compostos **C1** (à esquerda) e **C2** (à direita).

### Conclusões

As reações de complexação entre os ligantes **L1** e **L2** com CoCl<sub>2</sub>.6H<sub>2</sub>O resultaram em dois novos compostos de coordenação de cobalto (II). Os mesmos foram satisfatoriamente caracterizados, indicando a obtenção de complexos mononucleares contendo ligantes lábeis em suas esferas de coordenação.

### Agradecimentos

FAPERJ, CNPq, CAPES/PROCAD.

<sup>1</sup>López-Torres, E.; Zani, F. e Mendiola, M. A. Jour.. *Inorg. Biochem.* **2011**, 105, 600.

<sup>2</sup> Sun, R. W.; Ma, D.; Wong, E. L. e Che, C. *Dalton Trans.* **2007**, 43, 4884.

<sup>3</sup>Morcelli, S. R. *Dissertação, (Mestrado em Ciências Naturais) Universidade Estadual do Norte Fluminense.* **2012**, 110.