

Síntese e caracterização estrutural de um novo complexo de cobre (II) contendo os ligantes tenoiltrifluoroacetona e 2,2-bipiridina

Patrícia Silva Lopes¹ (IC), Drielly Aparecida Paixão¹ (PG), Silvana Guilardi¹ (PQ), Thiago Branco Mello^{1*} (IC), Javier Ellena² (PQ), Wendell Guerra¹ (PQ).

*e-mail: thiago.bmello@gmail.com

¹Instituto de Química, Campus Santa Mônica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia - MG.

²Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP.

Palavras Chave: Complexos de cobre, tenoiltrifluoroacetona, síntese.

Introdução

O papel central do DNA na replicação, transcrição e regulação dos genes levou a busca de nucleases artificiais, catalisadores capazes de quebrar a molécula de DNA. O desenvolvimento de pequenas moléculas capazes de catalisar a hidrólise do DNA em condições fisiológicas é de grande importância para aplicações biotecnológicas e para o desenvolvimento de novos agentes terapêuticos¹. Neste aspecto, sabe-se que complexos de Cu^{II} podem promover a formação de radicais livres via reação de Fenton e Haber-Weiss ocasionando quebra da molécula de DNA. Neste sentido, obteve-se neste trabalho um novo complexo de Cu^{II} contendo os ligantes: 2,2-bipiridina (bipy) e tenoiltrifluoroacetona (TTA). A estrutura do complexo foi determinada por difração de raios X.

Resultados e Discussão

O complexo [Cu(bipy)(TTA)]ClO₄ foi preparado pela reação envolvendo o perclorato de cobre(II) hexaidratado com bipy em acetonitrila. Depois de alguns minutos, o ligante TTA foi adicionado *in situ* e a mistura mantida à temperatura ambiente para evaporação lenta do solvente. Após alguns dias, cristais verdes foram obtidos, filtrados e separados para posterior análise. O complexo foi caracterizado por análise elemental (C, N e H) e os resultados encontrados estão condizentes com a fórmula proposta (os resultados encontrados estão entre parêntesis). %C = 39,97 (39,58), %H = 2,22 (2,08), %N = 5,18 (5,06).

Os dados de difração de raios X foram coletados em um difratômetro Nonius KappaCCD, à temperatura ambiente, usando radiação MoK α (0,71073 Å). Os dados de intensidade foram corrigidos pelos fatores de Lorentz e polarização. A estrutura foi resolvida por métodos diretos e refinada por mínimos quadrados (F²), utilizando matriz completa.

O composto cristaliza no sistema monoclinico, grupo espacial P2₁/n, Z = 4, a = 9,1989(2) Å, b = 17,4942(7) Å, c = 12,6929(5) Å, β = 92,993(2)°, V = 2039,9(1) Å³, D_c = 1,763 Mg.m⁻³, S = 1,063, R = 0,0606 para 2925 reflexões com I > 2 σ (I) e 290 parâmetros refinados.

No composto em estudo (Fig. 1), a unidade assimétrica contém um ânion ClO₄⁻ e um cátion [Cu(bipy)(TTA)]⁺. O cobre está coordenado por dois átomos de nitrogênio do ligante bipy e dois átomos de oxigênio do ligante TTA numa geometria quadrado planar distorcida.

O ângulo N-Cu-N [82,02(2)°] é consideravelmente menor que 90° devido ao caráter do ligante.

No empacotamento cristalino, além da ligação iônica, estão presentes interações fracas do tipo C-H...O entre cátions e ânions.

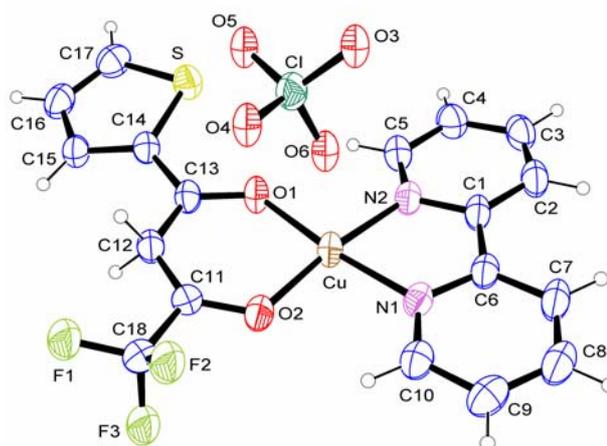


Figura 1. Representação ORTEP3 do composto em estudo.

Conclusões

Monocristais de um novo complexo de cobre(II) contendo bipiridina e tenoiltrifluoroacetona como ligantes foram obtidos para estudos por difração de raios X. Tendo em vista o potencial biotecnológico de complexos de cobre, estudos de atividade citotóxica e de interações com DNA estão sendo realizados.

Agradecimentos

À CAPES, CNPq, FAPEMIG e a UFU.

¹ Silva, Priscila P.; Guerra, Wendell; Silveira, Josiane N.; Ferreira, Ana Maria da C.; Bortolotto, Tiago; Fischer, Franciele L.; Terenzi, Hernan; Neves, Ademir; Pereira-Maia, Elene C., *Inorganic Chem.* **2011**, 50, 6414.