

Síntese/Determinação via Difração de Raios-X em Monocristal de um Complexo “cis” Anagnóstico de Cu(II) / Ligante Tiossemicarbazonato

Bárbara R. S. Feitosa^{1*} (IC), Adriano Bof de Oliveira¹ (PQ), Christian Näther² (PQ), Inke Jess² (PQ)

*barbara.chemistry@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000 São Cristóvão – SE

²Institut für Anorganische Chemie, Christian-Albrechts Universität, D-24118 Kiel – Alemanha

Palavras Chave: Química de Coordenação, Difração de Raios-X, Complexo de Cu(II), Tiossemicarbazonas

Introdução

Aproveitando a oportunidade de que a UNESCO declarou 2014 como o Ano Internacional da Cristalografia, são apresentados nesse trabalho a síntese e determinação estrutural de um complexo inédito de cobre(II) com um ligante derivado da tiossemicarbazona (TSC). As TSC's constituem uma classe de compostos de grande importância na química de coordenação, especialmente pela atividade farmacológica que é observada em vários de seus derivados^{1,2}. Os pontos mais importantes a desse trabalho são a coordenação dos ligantes em “cis”, o que é raro para esses ligantes devido ao decréscimo da simetria pontual da molécula, e à interação anagnóstica com valores próximos ao sistema “3 centros, 2 elétrons” com os átomos de C, H e Cu, sistema que é comum em catalizadores organometálicos.

Resultados e Discussão

O complexo foi obtido pela reação entre um ligante TSC derivado da tetralona e acetato de cobre(II) monohidratado em THF, com agitação magnética, temperatura ambiente, tempo de reação de 4 h e proporção estequiométrica de 2 TSC's : 1 Cu(II). Cristais adequados para a difração de raios-X em monocristal foram obtidos pela lenta evaporação do solvente em condições ambientes. O complexo possui fórmula $\text{Cu}(\text{C}_{17}\text{H}_{16}\text{N}_3\text{S})_2 \cdot 2(\text{C}_4\text{H}_8\text{O}) \cdot \text{H}_2\text{O}$, peso molecular de 814,54 g/mol, cristaliza no sistema monoclinico, grupo espacial $P 2_1/c$ (no. 14), $Z = 4$, e constantes de cela $a = 20.8571(14) \text{ \AA}$, $b = 8.8174(4) \text{ \AA}$, $c = 21.3938(15) \text{ \AA}$ e $\beta = 92.85(1)^\circ$ e $wR_1 = 0.0831$ com medidas à temperatura ambiente e a presença de solvatos (THF e H_2O). A coordenação dos ligantes TSC's na posição “cis” é extremamente incomum, pois leva necessariamente ao decréscimo da simetria da molécula. Esse fato é compensado pela interação do átomo de H com o metal, com distância $\text{H} \cdots \text{Cu} = 2,453(0) \text{ \AA}$, completando um ambiente de coordenação quadrático piramidal distorcido. As TSC's estão coordenadas pelos átomos de N e S, fato que é bem definido e reportado na literatura¹.

Na Figura 1 está representado o complexo de Cu(II) com as TSC's. As moléculas dos solvatos foram removidas para uma melhor clareza na visualização do composto e da esfera de coordenação.

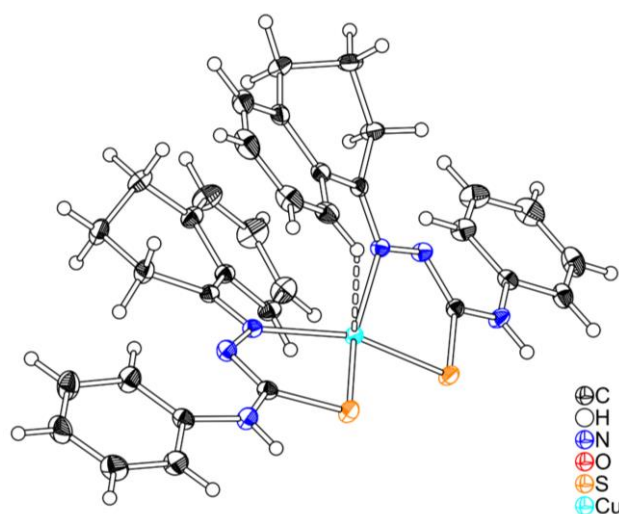


Figura 1. Representação estrutural do Complexo $\text{Cu}(\text{TSC})_2 \cdot 2 \text{ THF} \cdot \text{H}_2\text{O}$. As elipsóides térmicas estão representadas com a probabilidade de 40%.

A distância $\text{H} \cdots \text{C}$ e o ângulo $\text{C} \cdots \text{H} \cdots \text{Cu}$ de $121,87(11)^\circ$, configuram um sistema “3 centros 2 elétrons de natureza eletrostática”. A distância $\text{H} \cdots \text{Cu}$ não é suficiente para caracterizar uma ligação química de coordenação, mas é suficiente para intervir na simetria da molécula.

Conclusões

Foi sintetizado e caracterizado via difração de raios-X em monocristal um complexo de Cu(II) com ligantes TSC's. A coordenação das TSC's em “cis” e a interação eletrostática anagnóstica (3 centros, 2 elétrons) é muito incomum e merece destaque.

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. W. Bensch (Uni-Kiel), à FAPITEC (PPP 2011). B.R.S.F. agradece ao PIBIC-CNPq-UFS.

¹Lobana, T. S. *et al.*, *Coord. Chem. Rev.* **2009**, 253, 977.

²Oliveira A. B. *de et al.*, *Acta Cryst E*, **2012**, E68, o2581.