

COMPLEXOS DE Fe^{III} E Ni^{II} COM LIGANTES FENANTROLINA E N⁷-(2-HIDROXIBENZILIDENO)SEMICARBAZIDA

PALACIO, Mônica. ¹(monicajackeline.p45@gmail.com); SCHWADE, Vânia D. ²(vaniaschwade@ufgd.edu.br).

¹ Discente do curso de Química licenciatura e bacharelado da Universidade Federal da Grande Dourados. ² Docente do curso de Química da Universidade Federal da Grande Dourados.

INTRODUÇÃO

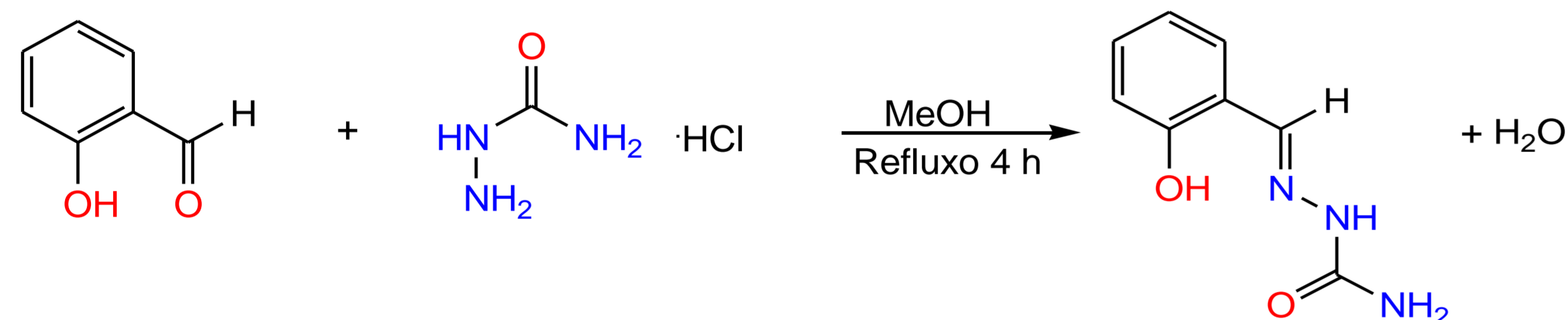
Ligantes hidrazonas (H₂L) derivadas da condensação de 2-hidroxibenzaldeído e semicarbazidas se mostram capazes de exibir tautomerismo amida-hidroxilimina. Ligantes quelantes N,N-doadores, como 1,10-fenantrolina (phen) ajudam a estabilizar as geometrias de coordenação preferenciais para cada íon metálico, permitindo a obtenção de complexos mononucleares ou binucleares quando o ligante hidrazona está presente, pois este último pode realizar ponte entre íons metálicos.¹ Vários complexos apresentam atividades biológicas.

OBJETIVO

1. Sintetizar o ligante N⁷-(2-hidroxibenzilideno)semicarbazida, (H₂L);
2. Testar a reatividade do ligante H₂L, com sais de sulfato dos íons metálicos Ni(II), Fe(II) e 1,10-fenantrolina;
3. Caracterizar os compostos usando a técnica de espectroscopia na região do infravermelho.

METODOLOGIA

A reação de síntese do ligante H₂L, foi realizado pela reação de condensação de 2-hidroxibenzaldeído e cloridrato de semicarbazida (1:1), em refluxo com metanol e agitação por 4 h, como pode ser visto no Esquema 1. Rendimento: 39%.



Esquema 1: Reação de síntese do ligante N⁷-(2-hidroxibenzilideno)semicarbazida, H₂L.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O complexo de Fe^{III} foi sintetizado agitando-se por 3 h à TA em MeOH, segundo a equação:



- ✓ Formou-se um precipitado preto, ao final da reação, com um rendimento de 56%.
- ✓ A estrutura mononuclear (Figura 1) proposta envolve coordenação do ligante monodesprotonado e sulfato, apresentando uma geometria tetraédrica para o complexo de Fe^{III}, evidenciado pelo IV devido ao desaparecimento do νOH, além de apresentar bandas em 3331, 3155(NH), 1666(CO) e 1119, 616(SO₄²⁻).
- ✓ Apresenta solubilidade em solventes coordenantes como DMF e DMSO.
- ✓ Uma busca no SciFinder e banco de dados CSD (cristalográfico)² mostrou não haver relatos de complexo de ferro apenas com HL⁻.

Compostos de coordenação de Fe^{III} e Ni^{II} foram sintetizados em MeOH e acetona, agitação por 3 h à TA, conforme:



- ✓ Formou-se um precipitado vermelho, com um rendimento de 85%.
- ✓ A estrutura mononuclear proposta envolve o ligante monodesprotonado, fenantrolina e água coordenados, além do íon sulfato como contra-íon, apresentando uma geometria octaédrica para o complexo de Fe^{III}. No IV observa-se bandas em 3388(OH), 1655(CO), 1112, 602(SO₄²⁻) e 724(σCC);



- ✓ A suspensão foi filtrada para isolamento do precipitado verde claro. Rend.: 53%.
- ✓ A estrutura mononuclear (Figura 1) ou dinuclear proposta envolve o ligante monodesprotonado com o oxigênio fenolato atuando em ponte, coordenação de phen e íon sulfato como contra-íon, apresentando NC 5 ou 6 para cada centro metálico de Ni^{II}. No IV observa-se bandas em 3353, 3165(NH), 3055(C(sp²)-H), 1650(CO), 1112(SO₄²⁻) e 726(σCC).

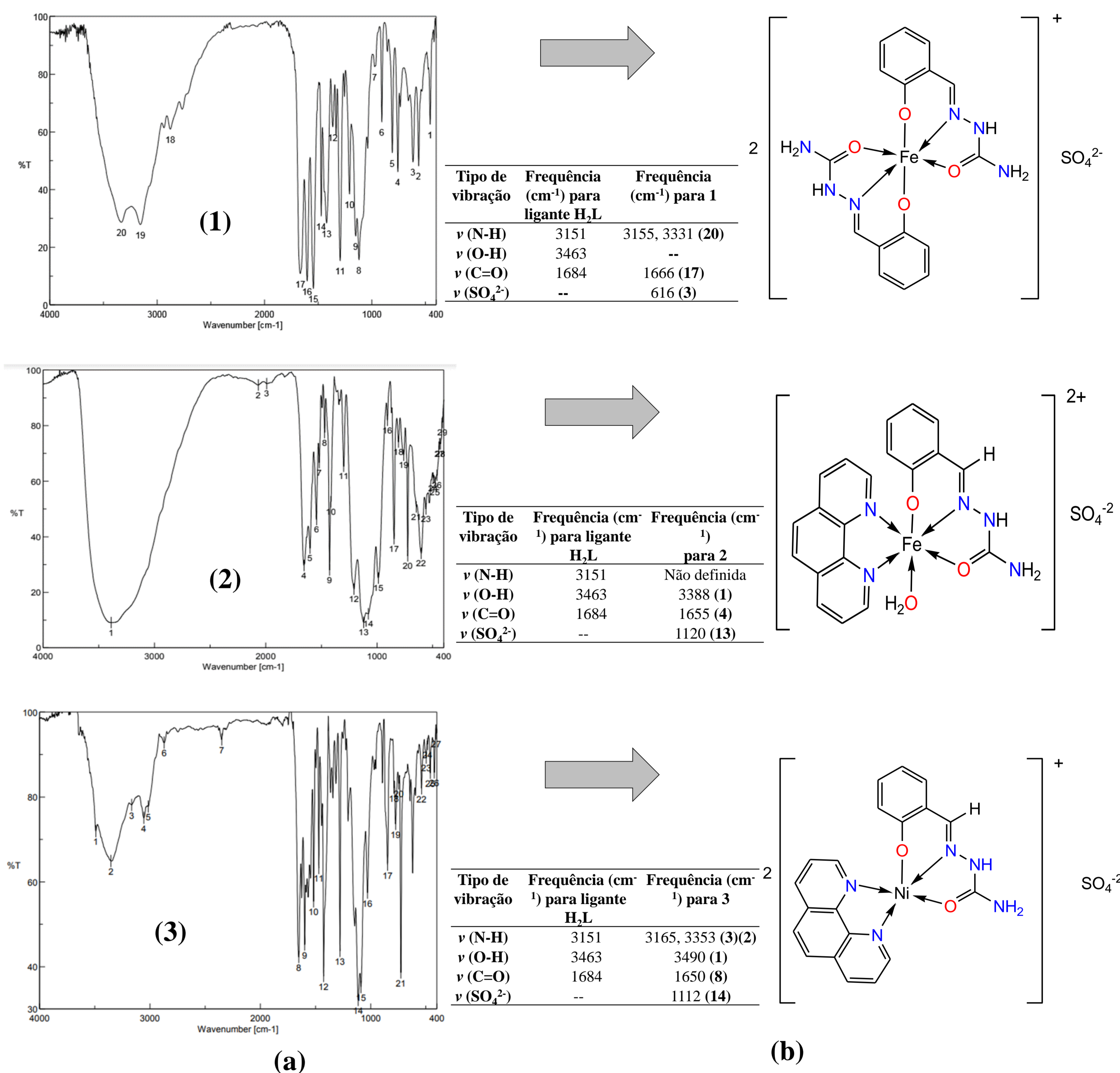


Figura 1: (a) Espectros de infravermelho dos compostos 1 a 3. (b) Estruturas propostas para os compostos 1 e 3.

CONCLUSÕES

A fenantrolina não é facilmente identificada por meio do infravermelho, pois suas bandas são sobrepostas pelas bandas do ligante hidrazona, especialmente no caso de H₂L. Portanto, o ligante H₂L reage com Fe^{III} formando um composto possivelmente monomérico de cor preta, além de reagir com íons Fe^{III}, e Ni^{II} na presença de phen e mudança do meio reacional, formando, respectivamente, monômero (cor vermelha) e monômero ou dímero (cor verde). Assim, os compostos, com variadas estruturas, encontram-se em estudo para caracterização e futuras aplicações, devido ao seu potencial em atividade biológica.

1. React. Inorg. Met.-Org. Chem., 1988, 18, 779.
2. Cambridge Structural Database. (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>)



Realização:

UFGD
Universidade Federal
da Grande Dourados

UEMS
Universidade Estadual
de Mato Grosso do Sul

Parceiros:

CAPES

CNPq
Conselho Nacional de Desenvolvimento
Científico e Tecnológico