

COMPLEXOS DE FEIII E NIII COM LIGANTES FENANTROLINA E N'-(2-HIDROXIBENZILIDENO)SEMICARBAZIDA

Mônica Palacio (monicajackeline.p45@gmail.com)

Vânia Denise Schwade (vaniaschwade@ufgd.edu.br)

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 ligante hidrazona está presente, pois este último pode realizar ponte entre íons metálicos. Vários complexos apresentam atividades biológicas. Dessa forma, este trabalho baseou-se na síntese e caracterização dos compostos: ligante H2L e de complexos de FeIII e NiII. H2L foi sintetizado pela reação de condensação de 2-hidroxibenzaldeído e semicarbazida (1:1), em refluxo e agitação por 4 h (rend. 39%). A obtenção de H2L é evidenciada pelo IV (ν_{max} , cm^{-1} , KBr): 3463(OH), 3151(NH), 3056(C(sp²)-H) e 1684(CO). O complexo de FeIII foi sintetizado agitando-se por 3 h à TA em MeOH, segundo a equação: $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{L} \rightarrow [\text{Fe}(\text{HL})(\text{SO}_4)]$ (sólido preto, rend. 56%). A estrutura mononuclear proposta envolve coordenação do ligante monodesprotonado e sulfato, apresentando uma geometria tetraédrica para o complexo de FeIII, evidenciado pelo IV devido ao desaparecimento do ν_{OH} , além de apresentar bandas em 3331, 3155(NH), 1666(CO) e 1119, 616(SO₄²⁻). Apresenta solubilidade em solventes coordenantes como DMF e DMSO. Compostos de coordenação de FeIII e NiII foram sintetizados em MeOH e acetona, agitação por 3 h à TA, conforme: (i) $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O} + 4 \text{ phen} + \text{H}_2\text{L} \rightarrow [\text{Fe}(\text{HL})(\text{phen})(\text{H}_2\text{O})]\text{SO}_4$ (sólido vermelho, rend. 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 FeIII. No IV observa-se bandas em 3388(OH), 1655(CO), 1112, 602(SO₄²⁻) e 724(sCC); (ii) $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O} + 2 \text{ phen} + \text{H}_2\text{L} \rightarrow 0,5 [\text{Ni}(\text{HL})(\text{phen})]_2(\text{SO}_4)$ (sólido verde claro, rend. 53%). A estrutura dinuclear proposta envolve o ligante monodesprotonado com o oxigênio fenolato atuando em ponte, coordenação de phen e íon sulfato como contra-íon, apresentando uma geometria octaédrica para cada centro metálico de NiII. No IV observa-se bandas em 3353, 3165(NH), 3055(C(sp²)-H), 1650(CO), 1112(SO₄²⁻) e 726(sCC). 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 FeIII formando um composto possivelmente monomérico de cor preta, além de reagir com íons FeIII, e NiII na presença de phen e mudança do meio reacional, formando, respectivamente, monômero (cor vermelha) e 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.