

“Estudo de síntese e estrutura de complexo de selênio e cobre (II)”

Rafael Augusto Corrêa Ferreira Miranda e Pedro Henrique Salgado Marcon e Prof. Dr. João Honorato de Araujo Neto

Instituto de Química (IQ)/Universidade de São Paulo (USP)

rafael_acfm@usp.br

Objetivos

O projeto tem como objetivo principal sintetizar e caracterizar compostos de complexos organometálicos formados entre o ácido selenodiácetico e o cobre (II). Além de relacionar os compostos formado com as técnicas de caracterização.

Métodos e Procedimentos

Síntese de SeCuBipy:

Em um balão de fundo redondo de 50 ml adicionaram-se 20 ml de Metanol (solvente) e posteriormente 29,6 mg (0,150 mmol) do ligante ácido selenodiácetico ($\text{Se}(\text{CH}_2\text{COOH})_2$) — sob agitação — que foi solubilizado imediatamente. Em seguida transferiram-se 1,23 mL da solução de base de hidróxido de sódio (NaOH) de concentração de 0,123 mol/L. Depois adicionaram-se 24,45 mg (0,157 mmol) de bipiridina ($\text{C}_5\text{H}_4\text{N}_2$) previamente pesada. Por fim adicionaram-se 25,40 mg (0,149 mmol) de cloreto de cobre (II) diidratado ($\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). Após a adição, a solução — inicialmente translúcida e incolor — adquiriu coloração azul ciano e após 3 minutos ficou turva mantendo a cor. O precipitado formado foi isolado por filtração e em sequência secado a vácuo enquanto o filtrado foi reservado à parte, com o objetivo de cristalizar.

Resultados

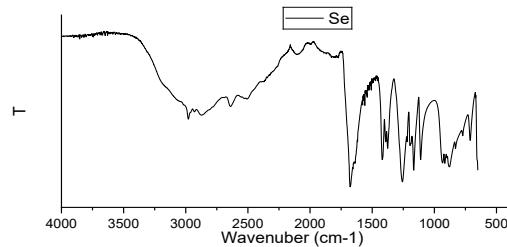


Figura 1- Análise do espectro de infravermelho do ligante: ácido selenodiácetico ($\text{Se}(\text{CH}_2\text{COOH})_2$)

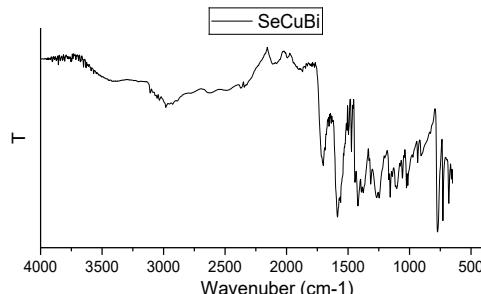


Figura 2- Análise do espectro de infravermelho do cristal de SeCuBipy 1:1:1

Do espectro de infravermelho podemos analisar a permanência da banda de C=O por volta de 1700cm⁻¹. O deslocamento da banda da bipiridina de 1576cm⁻¹ para 1495cm⁻¹. E o surgimento de duas bandas no espectro do complexo, uma na região 1585cm⁻¹ e outra em

1312cm⁻¹.

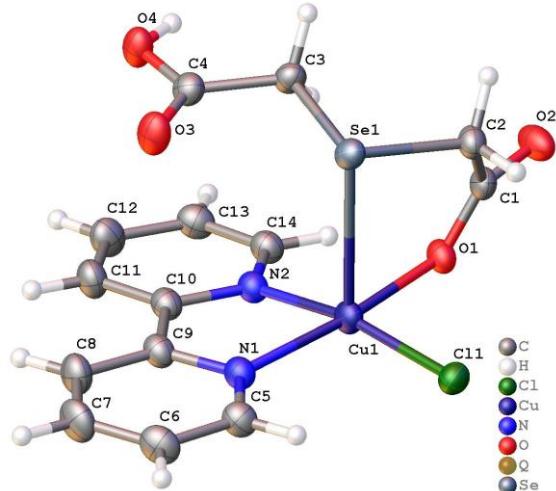


Figura 3- Análise da técnica de difração de raios x do cristal do composto SeCuBipy 1:1:1

Tabela 1 - Tamanho das Ligações

| Atom | Atom | Length/Å | Atom | Atom | Length/Å |
|------|------|------------|------|------|----------|
| Se1 | Cu1 | 2.7446(10) | N2 | C10 | 1.353(2) |
| Se1 | C2 | 1.9466(19) | N2 | C14 | 1.339(2) |
| Se1 | C3 | 1.9512(19) | C1 | C2 | 1.524(3) |
| Cu1 | Cl1 | 2.2633(9) | C3 | C4 | 1.505(3) |
| Cu1 | O1 | 1.9586(14) | C5 | C6 | 1.385(3) |
| Cu1 | N1 | 2.0071(17) | C6 | C7 | 1.379(3) |
| Cu1 | N2 | 2.0145(16) | C7 | C8 | 1.386(3) |
| O1 | C1 | 1.271(2) | C8 | C9 | 1.390(3) |
| O2 | C1 | 1.247(2) | C9 | C10 | 1.474(3) |
| O3 | C4 | 1.216(2) | C10 | C11 | 1.386(3) |
| O4 | C4 | 1.313(2) | C11 | C12 | 1.388(3) |
| N1 | C5 | 1.341(3) | C12 | C13 | 1.381(3) |
| N1 | C9 | 1.352(3) | C13 | C14 | 1.385(3) |

É possível observar que os tamanhos de ligação da carboxila do carbono C4 com a ligação C=O(C4/O3) e C-OH(C4/O4) possuem tamanhos de 1.21 Å e 1,31 Å respectivamente. Já a carboxila coordenada do carbono C1 com a ligação O2 tem 1,24 Å e o O1 tem 1,27 Å, como o tamanho da ligação C1-O1 está entre as ligações C4/O3 e C4/O4 provavelmente indica a ligação C-OH que foi desprotonada e está coordenada, logo, encurtando a ligação, já a ligação C=O do C1 e O2 sofre um enfraquecimento da ligação mostrado pelo aumento do tamanho de ligação para 1,24 Å.

Conclusões

O objetivo de sintetizar e caracterizar compostos de complexos organometálicos formados entre o ácido selenodiacético e o cobre (II) foi alcançado. As análises feitas evidenciam a formação de um complexo de geometria de pirâmide de base quadrada e seus pontos de ligação sendo eles: os nitrogênios da bipyridina de forma bidentada, do ácido selenodiacético sendo uma das carboxilas desprotonadas e o próprio selênio também de forma bidentada e tendo um cloro coordenado contribuindo para a neutralização de carga do composto. Com isso o projeto buscar continuar as sínteses e análises de novas estruturas.

Agradecimentos

O autor agradece à Universidade de São Paulo (USP), Instituto de Química da USP e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro. Também gostaria de agradecer ao Professor João pela oportunidade de realizar esse projeto, e ao doutorando Pedro por sua orientação e assistência ao longo desta jornada.

Referências

- [1] Rigaku Oxford Diffraction, 2019.
- [2] O. V. Dolomanov, L. J. Bourhis, R. J. Gildea, J. A. K. Howard and H. Puschmann, *J. Appl. Crystallogr.*, 2009, **42**, 339–341.
- [3] C. F. Macrae, I. J. Bruno, J. A. Chisholm, P. R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, L. Rodriguez-Monge, R. Taylor, J. Van De Streek and P. A. Wood, *J. Appl. Crystallogr.*, 2008, **41**, 466–470.
- [4] G. M. Sheldrick and IUCr, *Acta Crystallogr. Sect. A Found. Adv.*, 2015, **71**, 3–8.
- [5] G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr. Sect. C Struct. Chem.*, 2015, **71**, 3–8.