

“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 selenodiacético 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 selenodiacético ($\text{Se}(\text{CH}_2\text{COOH})_2$) — 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 bipyridina ($\text{C}_5\text{H}_4\text{N}_2$), 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

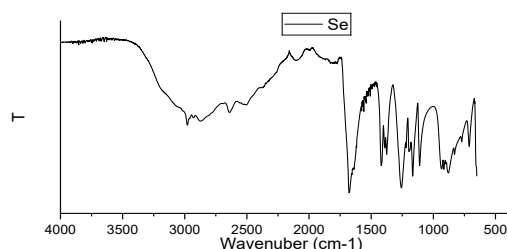


Figura 1- Análise do espectro de infravermelho do ligante: ácido selenodiacético ($\text{Se}(\text{CH}_2\text{COOH})_2$)

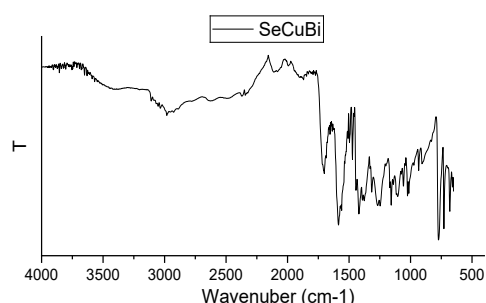


Figura 2- Análise do espectro de infravermelho do cristal de SeCuBipy 1:1:1

Do espectro de infravermelho podemos analisar a permanência da banda de C=O por volta de 1700cm^{-1} . O deslocamento da banda da bipyridina 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.

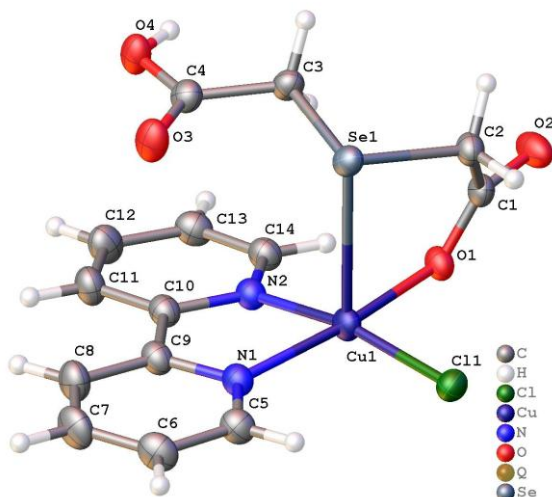


Figura 3- Análise da técnica de difração de raios x do cristal do composto SeCuBipy 1:1:1

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.