



Síntese e caracterização físico-química de compostos de coordenação de ferro(III) de relevância bioinorgânica

Crystiane Amim Pereira, Cristina Pinheiro Santiago, Christiane Fernandes Horn, Adolfo Horn Jr., Jackson A. L. C. Resende

Compostos de coordenação de ferro(III) contendo ligantes N,O-doadores, os quais possuem respectivamente, os grupos alfa e beta-naftol, foram relatados na literatura pelo nosso grupo de pesquisa em 2016 (Fernandes, C. et al. Inorg. Chem. Commun, 67,2016, 22.) Estes compostos apresentaram baixas atividades antitumorais, o que motivou o desenvolvimento de novos ligantes, nos quais um grupo fenol foi substituído por uma piridina, resultando em novos ligantes. O ligante HL1 foi sintetizado pela reação entre 2-(1-naftiloximetil)oxirano e bis-(2-piridilmetil)amina, sendo obtido na forma de um óleo marrom escuro, com rendimento de 98%, o ligante HL2 foi obtido similarmente, apenas substituindo o 2-(1-naftiloximetil)oxirano por 2-(2-naftiloximetil)oxirano, com rendimento de 82%. Estes foram caracterizados por ^1H RMN e espectroscopia de infravermelho. As reações de complexação entre estes ligantes e o sal $[\text{Fe}(\text{OH}_2)_6]\text{Cl}_3$ foram realizadas em etanol, sob refluxo por 24h, obtendo-se o composto **1**, na forma de monocristais avermelhados, com rendimento de 52%. Similar reação, empregando-se uma mistura de etanol e acetonitrila, à temperatura ambiente, resultou no composto **2**, com rendimento de 80%. Dados de difração de raios X para o composto **1** indicam a formação de um composto dinuclear de ferro(III), contendo uma ponte do tipo μ -oxo entre os centros metálicos. Dados de espectroscopia na região do infravermelho indicam a presença de bandas típicas dos ligantes, sendo obtidos espectros idênticos, já que tratam-se de compostos isômeros. A presença de uma banda intensa em 828 cm^{-1} para o composto **1** e em 840 cm^{-1} para o composto **2** indica a presença da ligação Fe(III)- μ -oxo-Fe(III). Dados de ESI(+)-MS indicam as mesmas espécies catiônicas para ambos os compostos de ferro(III), com valores de m/z de 400, 454, 462, 471, 489, 525, 959, 995 e 1015, sendo atribuídos, no caso do composto **1**, aos cátions: $[\text{L1}]^+$, $[\text{Fe}(\text{III})(\text{L1})]^+$, $[(\text{L1})\text{Fe}(\text{III})-(\mu\text{-O})\text{-Fe}(\text{III})(\text{L1})]^{2+}$, $[\text{Fe}(\text{III})(\text{L1})(\text{OH})]^+$, $[\text{Fe}(\text{III})(\text{L1})(\text{Cl})]^+$, $[\text{Fe}(\text{III})(\text{HL1})(\text{Cl})_2]^+$, $[\text{Cl}(\text{L1})\text{Fe}(\text{III})-(\mu\text{-O})\text{-Fe}(\text{III})(\text{L1})(\text{Cl})]^+$, $[\text{Cl}(\text{L1})\text{Fe}(\text{III})-(\mu\text{-OH})\text{-Fe}(\text{III})(\text{L1})\text{Cl}]^+$ e $[(\text{Cl})(\text{L1})\text{Fe}(\text{III})-(\mu\text{-Cl})\text{-Fe}(\text{III})(\text{L1})(\text{Cl})]^+$. Conclui-se que os novos compostos foram obtidos com êxito, e assim os estudos da atividade antitumoral poderão ser iniciados.

Palavras-chave: Compostos de coordenação de ferro(III), difração de raios X, caracterização físico-química.

Instituição de fomento: CNPq, FAPERJ.