

# Complexo acetilpiridina benzoil hidrazona com cobre (II): um estudo teórico.

João Batista Lopes Martins(PQ), Fernanda de Souza Tiago(PG)\*, Cláudia Cristina Gatto(PQ).  
Universidade de Brasília. [lopes@unb.br](mailto:lopes@unb.br)

Instituto de Química, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 70904970.

Palavras Chave: hidrazonas, DFT, complexo de cobre(II).

## Abstract

Acetyl benzoyl hydrazone complex of copper (II): A theoretical study. We aim to study the structural and electronic properties of hydrazones complexed with copper using DFT method.

## Introdução

Hidrazonas compõem uma classe de compostos, que apresentam complexas propriedades biológicas, incluindo antitumoral, antifúngica, antituberculose e anticonvulsivantes[1-2]. Estes compostos são frequentemente usados como ligantes, em química de coordenação, por possuírem um grupamento azotina  $-NHN=CH-$  e alguns de seus complexos metálicos apresentam propriedades biológicas acentuadas[3,4]. Em busca de complexos que potencializem essas propriedades biológicas, foi sintetizado e caracterizado por difração de raios-x e cálculos mecânico quânticos, o complexo de nitrato de cobre(II) com o ligante acetilpiridina benzoil hidrazona[5].

Todos os cálculos foram realizados com o pacote computacional Gaussian09. Para isso aplicou-se a Teoria do Funcional de Densidade (DFT), empregando os funcionais B3LYP, PBE1PBE, B3PW91 (híbridos), CAM-B3LYP (híbrido de longo alcance), B97-d (puro), M06 e o conjunto de bases atômicas LANL2DZ, para o cobre e 6-31G(d, p) para os demais átomos.

## Resultados e Discussão

O complexo de nitrato de cobre(II)-hidrazona possui em sua estrutura dois ânions nitrato e uma molécula do ligante hidrazona coordenados ao metal (Figura 1b). O cobre(II) possui número de coordenação seis, portanto o complexo apresenta geometria octaédrica distorcida, isso porque os ângulos das ligações diferem muito de  $90^\circ$ , concordando com o observado em complexos com ligantes hidrazona análogos[6].

As previsões teóricas concordam com o experimental. Os maiores desvios se verificam na planaridade do ligante hidrazona e nos comprimentos de ligação Cu-O, para os oxigênios do ânion nitrato, presentes na esfera de coordenação. O ligante hidrazona encontra-se

inclinado, o que pode ser atribuído diretamente à coordenação do ligante, já que em ligantes análogos também é planar[7].

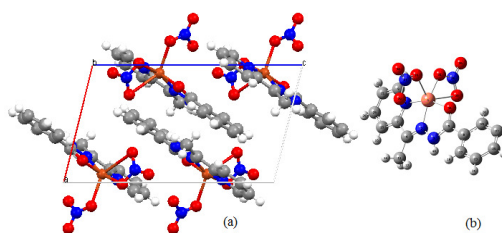


Figura 1. Complexo de nitrato de cobre(II)-hidrazona, (a) cela unitária, (b) molécula.

Na comparação entre os funcionais utilizados, apesar dos valores de desvio individual e médio (da ordem de 17%), há uma uniformidade entre os resultados. Isso sugere que os desvios com relação aos dados experimentais encontrados não estão relacionados à escolha do funcional, mas sim a outros fatores, tais como o uso de uma molécula isolada para proceder ao cálculo. Esse fato foi comprovado pelo cálculo periódico feito, no qual foram encontrados maior proximidade com os dados experimentais, com desvio médio de 4,3%.

## Conclusões

A estrutura cristalina tem papel determinante na estrutura molecular para o complexo em questão. Assim, cálculos para a continuidade deste trabalho, que melhor a elucidem, podem esclarecer o papel das interações intramoleculares presentes.

## Agradecimentos

CNPq, FAPDF, FINATEC, CAPES

<sup>1</sup> El-Sabbagh, O.I. and Rady, H.M., Eur. J. Med. Chem., 3680,44, 2009.

<sup>2</sup> Reis, R.R., et al., Eur. J. Med. Chem., 46, 1448, 2011.

<sup>3</sup> Sharma, R.N., et al., Asian J. Chem., 7683, 22, 2010.

<sup>4</sup> Chimenti, F., et al., Med. Chem., 51, 4874, 2008.

<sup>5</sup> Gatto, C.C., In: Dados não publicados. 2012.

<sup>6</sup> Özbek, N., et al., J. Mol. Struct., 919, 154, 2009.

<sup>7</sup> Tamasi, G., et al., J. Inorg. Biochem., 99, 1347, 2005.