Etude par diffraction des rayons X à 100 K d'un complexe de cuivre de la cyanoguanidine : structure et résultats préliminaires de densité électronique

A. Spasojevic-de Biré*[1], A. Kremenovic[1,2], Nour Eddine Ghermani[3] et P. Hubberstey[4]

[1] Laboratoire de Structures, Propriétéset Modélisation des Solides (SPMS), UMR 8580, Ecole Centrale Paris, 1, Grande Voie des Vignes, 92295 Châtenay-Malabry, France
[2] Faculty of Mining and Geology, Dept. of Crystallogr., Djusina 7, 11000 Belgrade, Yougoslavie
[3] Laboratoire de Physique Pharmaceutique UMR CNRS 8612, Faculté de Pharmacie 5, Rue Jean-Baptiste Clément, 92296 Châtenay-Malabry cedex, France
[4] Chemistry Dept. Nottingham University, NG7 2RD, Grande-Bretagne

Le ligand de type cyanoguanidine ($N_\alpha C_\beta N_\gamma C_\delta(N_\varepsilon R_2)_2$) est une molécule mono ou bidentate pouvant former des complexes métalliques variés. Du point de vue pharmacologique, la cyanoguanidine est connue pour favoriser le passage extra-cellulaire du potassium et est utilisée comme médicament antihypertenseur. Cette activité est très certainement liée à la structure originale de cette molécule présentant une grande variété de longueurs de liaison C-N (voir tableau ci-dessous) et un mode de coordination σ_1 (linéaire ou coudée) ou $\mu(\sigma_1\text{-}\sigma_3)$. De plus, le complexe cuivre-cyanoguanidine possède un intérêt biologique. En effet, lorsque les complexes sont dinucléaires, chaque atome de cuivre est en coordination 3. Cette arrangement métal-ligand facilite alors l'établissement de liaison avec O_2 favorisant ainsi le transport de l'oxygène et la réduction de l'oxygène de l'eau. Une étude de diffraction des rayons X à 100 K a été menée sur le complexe Cu-cyanoguanidine $[Cu\{Et_2N)(NH_2)CNCN\}_2\{H_2O\}_2Cl]Cl$ cristallisant dans le système orthorhombique (groupe d'espace $P2_12_12_1$) avec des paramètres de maille : a = 9,1186(4), b = 12,4878(7), c = 18,902(2) Å. Les données ont été enregistrées sur un diffractomètre Siemens (Bruker) à détecteur CCD en utilisant la longueur d'onde du Molybdène.

Le tableau suivant donne les principales distances de liaison (Å) obtenues après l'affinement de la structure.

$Cu\text{-}N_\alpha$		1,934(6)	1,937(6)	
$N_\alpha\text{-}C_\beta$		1,171(9)	1,170(9)	
$C_\beta\text{-}N_\gamma$		1,282(9)	1,282(8)	
$N_\gamma\text{-}C_\delta$		1,359(8)	1,350(8)	
$C_\delta\text{-}N_\varepsilon$	1,328(10)	1,325(9)	1,344(8)	1,330(8)
$N_\varepsilon\text{-}C_{Et}$	1,479(9)	1,472(9)	1,472(9)	1,455(8)

Un affinement multipolaire de la densité électronique du complexe Cu-cyanoguanidine est en cours. Le but de cette étude étant de caractériser les différentes liaisons C-N du ligand en fonction de leurs longueurs et de mettre en évidence les interactions avec le métal de transition.

* spaso@spms.ecp.fr