

## Síntese e caracterização de dois novos complexos binucleares de ferro(III) de relevância bioinorgânica

Sarah da S. Ferreira<sup>1</sup> (PG)\*, Érika S. Bull<sup>1</sup> (PG), Nathalia O. B. de Nogueira<sup>1</sup> (IC), Christiane Fernandes<sup>1</sup> (PQ), Adolfo Horn Jr.<sup>1</sup> (PQ), Valderes Drago<sup>2</sup> (PQ). \*sarah.ferreira@uenf.br

<sup>1</sup>LCQUI, UENF, Campos dos Goytacazes, RJ; <sup>2</sup>Departamento de Física, UFSC, Florianópolis, SC.

Palavras Chave: complexos de ferro(III), modelos sintéticos, caracterização estrutural.

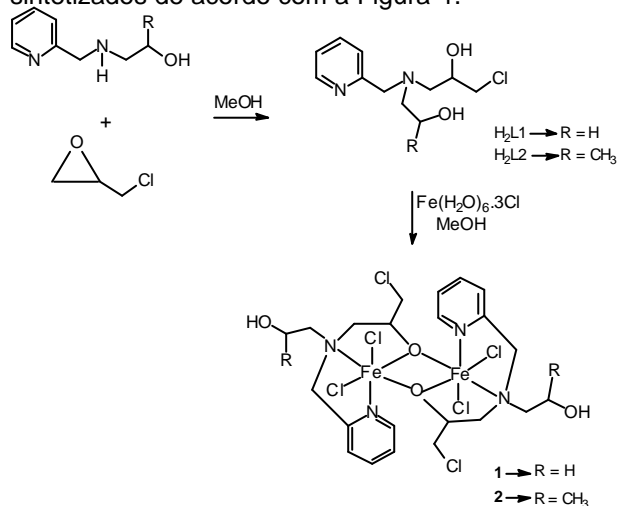
### Introdução

O estudo da química de coordenação tem sido considerado essencial para o entendimento das características estruturais e funcionais das metaloproteínas, permitindo uma investigação sistemática dos fatores que afetam as suas reatividades.<sup>1</sup> Neste contexto, a síntese de novos ligantes e o estudo das propriedades físico-químicas e estruturais que eles inferem ao centro metálico são etapas de fundamental importância.<sup>2</sup>

No intuito de desenvolver compostos de ferro que possam atuar como oxirredutases e/ou hidrolases sintéticas, apresentamos aqui a síntese de dois novos ligantes e a caracterização espectroscópica e eletroquímica dos seus respectivos complexos.

### Resultados e Discussão

Os ligantes e seus respectivos complexos foram sintetizados de acordo com a Figura 1.



**Figura 1.** Esquema de síntese dos ligantes  $H_2L1$  e  $H_2L2$  e dos seus respectivos complexos.

Os compostos  $[Fe_2(HL1)_2Cl_4] \cdot \frac{1}{2}MeOH$  **1** e  $[Fe_2(HL2)_2Cl_4]$  **2** foram caracterizados por espectroscopias de infravermelho, Mössbauer e eletrônica, voltametria cíclica, condutivimetria e análise elementar de CHN (Tabela 1). Os espectros de infravermelho dos dois complexos são similares, sendo caracterizados principalmente pelas bandas dos ligantes, indicando que a coordenação dos íons

metálicos aos respectivos ligantes foi efetiva. A observação de dois processos redox na voltametria cíclica indica que **1** e **2** são compostos binucleares, enquanto que os valores de condutividade revelam que os mesmos são compostos neutros. A análise Mössbauer apresentou apenas um dubleto para cada composto, com parâmetros típicos de ferro(III) spin alto. A espectroscopia eletrônica revela uma banda na região de 400 nm atribuída a TCLM  $Cl \rightarrow Fe^{III}$ ,<sup>2</sup> o que reforça a presença de íons cloro coordenados aos átomos de ferro.

**Tabela 1.** Dados de caracterizações físico-químicas dos complexos **1** e **2**.

CHN	<b>1</b> → C=35,62(35,57); H=4,57(4,61); N=7,40(7,54)
%Exp.	<b>2</b> → C=37,41(37,39); H=4,85(4,97); N=7,17(7,27)
(Calc.)	
Mössbauer (298 K)	<b>1</b> → $d = 0,33$ mm/s; $\Delta EQ = 0,69$ mm/s <b>2</b> → $d = 0,33$ mm/s; $\Delta EQ = 0,96$ mm/s
Condutividade (DMF)	<b>1</b> → $40 \text{ ohm}^{-1} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}$ <b>2</b> → $40 \text{ ohm}^{-1} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}$
Voltametria cíclica (DMF)	<b>1</b> → $E_{1/2} = -1,208$ V; $-0,453$ V <b>2</b> → $E_{1/2} = -1,176$ V; $-0,456$ V

### Conclusões

As caracterizações realizadas para os complexos **1** e **2** revelam que os ligantes utilizados são binucleantes, gerando compostos que podem ser usados na mimetização de enzimas binucleares de ferro, como as fosfatases ácidas púrpuras e a metano monoxigenase.

### Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPERJ

<sup>1</sup> Musie, G. T.; Li, X. e Powell, D. R. *Inorg. Chim. Acta*, **2004**, 357, 1134.

<sup>2</sup> Carvalho, N. F.; Horn Jr., A.; Bortoluzzi, A. J.; Drago, V. e Antunes, O. A. C. *Inorg. Chim. Acta*, **2006**, 359, 90.