

Síntese e estrutura de um novo complexo mononuclear de La(III) - promissor modelo funcional para as hidrolases.

Maryene Alves Camargo^{1*} (PG), Ademir Neves¹ (PQ), Adailton João Bortoluzzi¹ (PQ).

¹ LABINC Laboratório de Bioinorgânica e Cristalografia Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Campus Trindade, BR-88040-900 Florianópolis – SC *maryene@renami.com.br

Palavras Chave: Bioinorgânica, Complexo de La(III), estrutura, complexo modelo, hidrolases.

Introdução

Os íons lantanídeos, como fortes ácidos de Lewis, com altas densidades de cargas, altos números de coordenação, ausência de química redox e fortes labilidades, tornam-se bastante promissores na atividade catalítica de clivagem de ligações fosfodiésteres (hidrolases sintéticas).

Dessa forma, nesse trabalho é apresentado a síntese e estrutura de um novo complexo mononuclear de lantânio $[La(H_2L)(H_2O)(NO_3)_3]$ (**1**), o qual apresenta-se como um promissor agente catalítico frente a hidrólise de ésteres de fosfato.

Resultados e Discussão

O complexo **1** foi preparado a partir da reação do ligante H_2L ¹ (2 mmol) com o sal de $La(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ (2 mmol) em metanol com agitação magnética a 40 °C por 40 min.

Monocristais suscetíveis à análise por difração de raios-X foram obtidos a partir de recristalização numa mistura de acetona/acetonitrila.

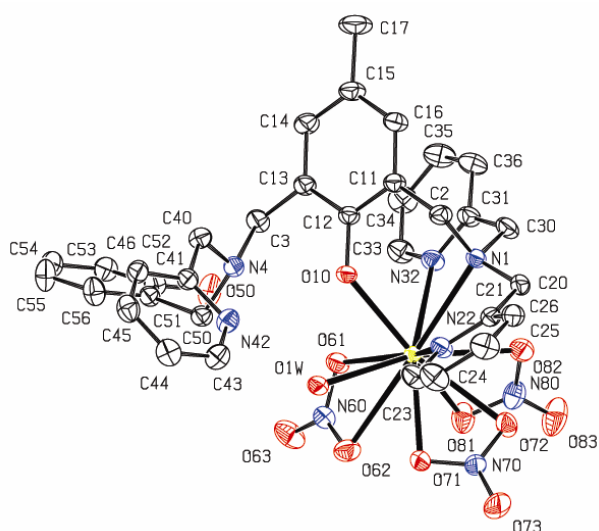


Figura 1. ORTEP do complexo mononuclear $[La(H_2L)(H_2O)(NO_3)_3]$

O complexo **1** cristalizou no sistema triclinico, no grupo espacial P-1. A estrutura cristalina do complexo (figura 1) apresenta como espécie central um íon lantânio (La^{III}) com NC = 11.

Tabela 1. Comprimentos de ligação selecionados.

La-O(10)	La-O(1W)	La-O(61)	La-O(81)
2.4162(16)	2.5696(17)	2.6036(18)	2.659(2)
La-O(71)	La-O(82)	La-N(22)	La-N(1)
2.6885(18)	2.7454(19)	2.752(2)	2.7665(18)
La-O(72)	La-N(32)	La-O(62)	
2.7812(19)	2.809(2)	2.8773(19)	

O ligante não simétrico H_2L se coordena a espécie central através do seu sítio macio, constituído pelo nitrogênio amínico N1, pelos nitrogênios piridínicos N22 e N32 e pelo oxigênio O10 do fenolato. A esfera de coordenação do metal é completada por uma molécula de água e três nitratos coordenados de forma bidentada.

O composto **1** apresenta um complexo sistema de ligações de hidrogênio inter e intramoleculares:

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	<(DHA)
O(1W)-H(1WA)...N(42)	0.78	2.04	2.804(3)	163.7
O(1W)-H(1WB)...O(71)#1	0.71	2.23	2.900(2)	157.2
N(4)-H(4)...O(10)	0.94	1.81	2.627(2)	144.0
O(50)-H(50)...O(61)#2	0.89	2.57	3.381(3)	151.5
O(50)-H(50)...O(63)#2	0.89	2.07	2.872(3)	148.8

* Transformações de simetria usadas para gerar átomos equivalentes: #1 -x+1, -y+1, -z+2 #2 -x+1, -y+1, -z+1

Conclusões

Nesse trabalho são apresentadas a síntese e a estrutura de um novo complexo mononuclear de La(III), o qual apresenta-se como um promissor modelo funcional para hidrolases. Estudos cinéticos com diésteres de fosfato estão em andamento.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq

¹ Lanznaster, M.; Neves, A., et al. *J. Biol. Inorg. Chem.* **2005**, *10*, 319.