

O Complexo do Ácido Guanidoacético com o íon Zn(II): Estrutura Cristalina

Jussara Lopes de Miranda^{1*}(PQ), Judith Felcman² (PQ, Bernardo Rodrigues (PQ)

1-Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 21945-970. * e-mail: jussara@iq.ufri.br

2- Pontifícia Universidade Católica – PUC-Rio, Rio de Janeiro

Palavras Chave: Zn, ácido guanidinoacético,

Introdução

O ácido guanidoacético (GAA) é um aminoácido sintetizado principalmente nos rins, estando envolvido em diversos processos biológicos como o metabolismo renal, a síntese do colesterol, o metabolismo da insulina, dentre outros. Por apresentar o grupo guanidino, o GAA também é capaz de realizar interações guanidino-carboxilato [1], importantes no reconhecimento molecular em determinados sítios.

A coordenação do GAA já foi investigada com alguns íons, tanto em no meio aquoso como em complexos no estado sólido. Foram observados diferentes tipos de coordenação: a bidentada, envolvendo o nitrogênio do grupo alfa-amino e o oxigênio do carboxilato e a μ -bidentada através dos dois átomos de oxigênio do carboxilato [2].

O estudo da coordenação do GAA com o Zn(II) torna-se importante tendo em vista que este íon também está envolvido em sítios contendo interações guanidino-carboxilato.

Neste trabalho, um novo complexo de Zn(II) com GAA foi sintetizado, tendo a sua estrutura cristalina elucidada pela difração de Raios X.

Resultados e Discussão

A síntese do complexo de Zn(II) com GAA ($ZnC_6H_{17}N_6O_5Cl_3$) consistiu na reação entre a solução aquosa de GAA (5 moles) e a aquosa de cloreto de zinco(II) (2,5 moles) a 60°C com agitação vigorosa durante 24 h. O pH foi ajustado na faixa de 5 a 6, mediante adição de solução de KOH.

A estrutura cristalina foi resolvida por difração de Raios-X. O composto cristalizou-se segundo o grupo P21/C. A unidade assimétrica do cristal é composta do complexo $[Zn(GAA)Cl_3]^-$, uma molécula de água e uma unidade protonada do GAA, $H(GAA)^+$. A molécula de água liga-se através de ligações hidrogênio ao $[Zn(GAA)Cl_3]^-$ e ao $H(GAA)^+$. O íon Zn(II) está coordenado de forma monodentada a um átomo de oxigênio do GAA e a três cloretos, formando uma estrutura tetraédrica. As distâncias das ligações Zn-Cl estão na faixa de 2.26Å – 2.28Å. Os parâmetros geométricos mostram uma deslocalização eletrônica no grupo carboxilato do

GAA, O1-C1-O2, que está coordenado ao Zn(II). De forma distinta, o grupo caboxilato do GAA não coordenado $H(GAA)^+$ claramente apresentam uma ligação dupla (C4-O4, 1.217(5)Å) e uma simples (C4-O3, 1.297(5)Å).

Na fig.1 é mostrada a estrutura cristalina do complexo $[Zn(GAA)Cl_3](HGAA)(H_2O)$

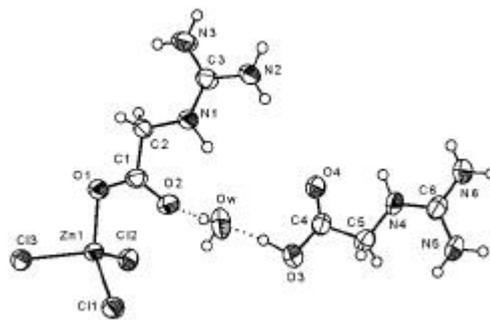


Fig.1.Estrutura Cristalina de $[Zn(GAA)Cl_3](HGAA)H_2O$

Conclusões

Neste trabalho, apresentou-se a primeira estrutura cristalina de um complexo de Zn(II) com o GAA, formando um complexo tetraédrico, $[Zn(GAA)Cl_3](HGAA)H_2O$, onde a coordenação ocorreu através de um oxigênio do carboxilato e de três íons Cl^- . Há ainda uma molécula de água ligada ao carboxilato e a outra unidade $HGAA^+$. Este tipo de coordenação e interação do Zn(II) com o GAA pode, então, contribuir para o entendimento das diversas funções biológicas que este aminoácido apresenta em nosso organismo.

Agradecimentos

¹ Miranda, J., L., Felcman, J., *Polyhedron* **2003**, 22, 225.

Felcman J, Howie RA, de Miranda JL, Skakle JMS, Wardell JL

²Acta Crystallographica Section C-Crystal Structure Communications **2003**,59: M103-M106

³ Miranda, J., L., Felcman, J., Versiane, O, Herbst, MH., *Inorganic Chemistry Coommunication* **2004**, 7,1198.