

Síntese e caracterização de dois novos complexos de Fe(III): busca por compostos miméticos das catecóis dioxigenases

Marcione D.E. Tiradentes¹ (IC)*, Christiane Fernandes¹ (PQ), Adolfo Horn Jr.¹ (PQ), Lorenzo do C. Visentin² (PQ), Jairo Bordinhão² (PQ) *in memoriam*. *marcionetiradentes@yahoo.com.br

¹LCQUI, UENF, Campos dos Goytacazes, RJ. ² DQI, IQ, UFRJ

Palavras Chave: ligante tripodal, ferro, estrutura de raios X

Introdução

Compostos fenólicos têm sido largamente produzidos como resíduos de atividades industriais, (petroquímicas, corantes) e agrícolas (herbicidas, inseticidas e fungicidas).¹ Estes compostos quando lançados no ambiente podem ser acumulados, tornando-se motivo de grande preocupação. Como alternativa para o tratamento destes tipos de resíduos uma classe de enzimas denominadas catecóis dioxigenases têm sido utilizada, visando a transformação destes compostos, em derivados menos tóxicos.² As catecóis dioxigenases são metaloenzimas mononucleares de ferro capazes de promoverem a clivagem intra ou extradiol.

No intuito de desenvolver compostos de ferro que possam mimetizar a atividade das catecóis dioxigenases, apresentamos aqui a síntese e a caracterização de dois novos ligantes e de seus respectivos complexos de ferro.

Resultados e Discussão

Os ligantes L1 e L2 foram sintetizados de acordo com o esquema reacional apresentado na Figura 1.

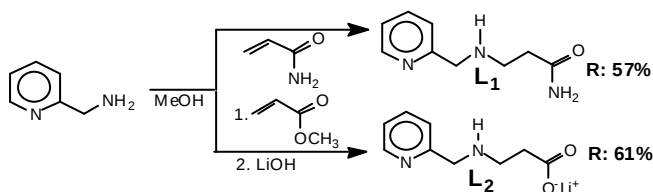


Figura 1. Esquema de síntese dos ligantes L1 e L2.

Os ligantes foram caracterizados por espectroscopia de Infravermelho e RMN ¹H e ¹³C. Os ligantes foram complexados com ferro seguindo o esquema apresentado na Figura 2. Os compostos foram caracterizados por espectroscopia de infravermelho e voltametria cíclica. Estas técnicas indicam que o composto **C1** é mononuclear ($E_{1/2} = -341$ mV vs. Fc/Fc⁺) e o composto **C2** é binuclear ($E_{1/2} = -369$ e -540 mV vs. Fc/Fc⁺). A obtenção de monocristais do composto 1 permitiu a resolução da sua estrutura molecular por difração de raios X (Figura 3), a qual confirmou a estrutura mononuclear com o íon Fe³⁺ coordenado a uma molécula do ligante de forma meridional e a três íons cloretos.

31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

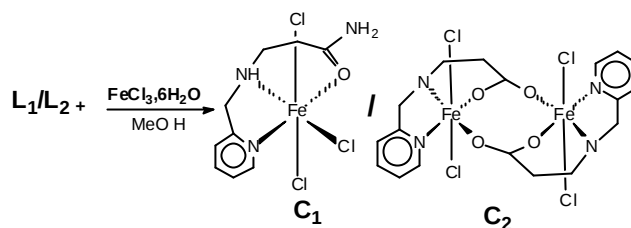
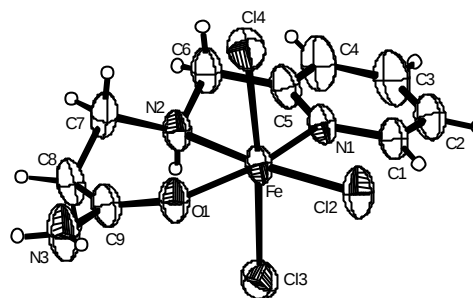


Figura 2. Esquema de síntese dos complexos **C1** e **C2** a partir dos ligantes L1 e L2, respectivamente.

Figura 3. Diagrama Zortep para o complexo **C1**.



Principais comprimentos de ligação (Å): Fe(1)-O(1) 2.071(3), Fe(1)-N(1) 2.151(3), Fe(1)-N(2) 2.193(3), Fe(1)-Cl(2) 2.3283(13), Fe(1)-Cl(4) 2.3472(14), Fe(1)-Cl(3) 2.3616(14)

Conclusões

As caracterizações indicam que o ligante L1 dá origem a um composto mononuclear e o ligante L2 a um binuclear. A presença de ligantes lábeis (cloretos) coordenados aos íons Fe³⁺ tornam os compostos de interesse para mimetizar a atividade das catecóis dioxigenases, tendo em vista que derivados de catecóis podem substituir facilmente os cloretos na esfera de coordenação do ferro.

Agradecimentos

CNPq, FAPERJ.

¹ Bugg, T. D. H. e Winfield. C. J. *Nat. Prod. Rep.* **2001**, 5, 550.

² Gianfreda, L.; Sannino, F.; Rao, M. A. e Bollag, J. M. *Water Res.* **2003**, 37, 3205.

³ Costas, M.; Mehn, M. P.; Jensen, M. P. e Que, Jr., L. *Chem. Rev.* **2004**, 104, 939.