

Avaliação espectroscópica da participação de átomos de nitrogênio na coordenação do íon cobre(II)

Leonardo V. de Freitas (IC)¹, Rafaela dos S. Moraes (IC)¹, Maria Stella N. de Oliveira (IC)¹, Thaís Valéria B. Alves (IC)¹, Elaine Rocha da Luz (PG)^{1,2}, Jacqueline A. da Silva (PQ)², Judith Felcman (PQ)² e Andréa de Moraes Silva (PQ)^{1*}. andreamoraess@oi.com.br

¹Centro Federal de Educação Tecnológica de Química de Nilópolis (RJ) – Nilópolis; ²PUC-Rio

Palavras Chave: *cobre(II), compostos de coordenação, espectroscopia*

Introdução

A energia absoluta e a intensidade das bandas de absorção oferecem informações sobre os tipos de ligantes em torno do íon metálico e sua geometria.

A substituição de oxigênios da água por nitrogênios na esfera de coordenação do íon Cu(II), desloca consideravelmente a banda d-d para regiões de alta energia enquanto a intensidade da banda aumenta de 10 para o íon aquoso para 150 mol⁻¹.L.cm⁻¹. A tabela 1 apresenta uma correlação entre esses fatores. Os valores, porém, não devem ser considerados como limites rígidos já que a energia também depende da estereoquímica e da natureza do nitrogênio ligado ao íon.

Tabela 1. Valores comuns para as energias de transição d-d para complexos com 1, 2, 3 e 4 nitrogênios coordenados¹

Complexo	$\lambda_{(Max)}$ (nm)	ϵ (mol ⁻¹ .L.cm ⁻¹)
1 N	730-680	30-60
2 N	670-620	40-120
3 N	590-540	100-150
4 N	530-500	120-200

Neste resumo são apresentados alguns resultados experimentais obtidos para complexos do íon cobre (II) com os aminoácidos serina (Ser), asparagina (Asn) e glutamina (Gln) e que podem ser analisados pela teoria descrita acima, auxiliando na avaliação da participação de átomos de nitrogênio na coordenação do íon cobre(II). Esses resultados são comparados com outros existentes na literatura.

Resultados e Discussão

Foram utilizadas soluções aquosas de cada ligante e de cobre(II), preparados na proporção metal-ligante, 1:1. Trabalhou-se na temperatura de 25°C e o pH foi variado com a adição de KOH 1,0 mol.L⁻¹, sob força iônica constante.

Foram obtidos e analisados os espectros de absorção na região da luz visível de vários aminoácidos e comparados com dados já existentes para o ATP² e para a tetraamina³. Na tabela 2 são apresentados alguns dos resultados obtidos.

Tabela 2. Correlação entre pH, comprimento de onda máximo (?) e absorvidade molar (ϵ)

Sistema	pH	$\lambda_{(Max)}$ (nm)	ϵ (mol ⁻¹ .L.cm ⁻¹)
Cu(II):Ser	3,92	766,0	20,88
	6,30	714,0	32,07
	7,10	692,0	39,89
	9,59	633,0	62,80
Cu(II):Asn	3,77	784,9	20,40
	6,96	689,0	32,40
	7,72	658,0	40,80
	9,96	623,0	70,80
Cu(II):Gln	3,84	773,0	16,80
	6,71	694,0	32,40
	7,45	650,0	39,60
	10,04	624,0	58,80
Cu(II):ATP ²	3,55	818,4	20,88
	6,28	782,0	30,94
	7,22	769,2	35,42
	10,19	720,4	39,31
Cu(II):tetraamina ³	3,01	580,0	60,36
	6,03	562,0	174,90
	7,34	562,0	177,20
	9,34	562,0	178,50

Conclusões

Utilizando-se a tabela 1 na análise dos resultados obtidos, confirma-se a participação do átomo de nitrogênio da serina na coordenação do íon cobre em pH~7. Para os aminoácidos asparagina e glutamina, que possuem dois átomos de nitrogênio em suas estruturas, sugere-se que somente um nitrogênio participe efetivamente da coordenação. Em valores altos de pH, porém, a asparagina apresenta uma maior possibilidade de participação do segundo nitrogênio na coordenação. Para o ATP, os resultados indicam que o átomo de nitrogênio não participa, pelo menos diretamente, na coordenação. Para a tetraamina, os resultados indicam que a coordenação entre o pH 6,03 e o pH 9,34 ocorre com a mesma quantidade de átomos de nitrogênio, efetivamente por 3 nitrogênios e a participação menos eficaz do quarto nitrogênio.

Agradecimentos

CNPq e CEFET Química-RJ

¹KOZLOWSKI, H.; MICERA, G. **Handbook of Metal-Ligand Interac. in Biological Fluids**. Ed. Guy Berthon, Vol.1, 1995. 566-581.

²SILVA, A. M. et al., *Polyedron*, v.25, n.6, 1319-1326, 2006.

³SILVA, J. A. et al. *Inorg. Chim. Acta*, 356, 155-156, 2003.