

Síntese e caracterização de um novo composto binuclear de Mn^{II}Mn^{III} de interesse bioinorgânico.

Sarah da S. Ferreira¹ (PG)*, Josane A. Lessa¹ (PG), Michelle R. e Rocha¹ (IC), Christiane Fernandes¹ (PQ), Adolfo Horn Jr.¹ (PQ), Annelise Casellato² (PQ), Gerhard Schenk² (PQ). *sarah.ferreira@gmail.com

¹LCQUI, Universidade Estadual do Norte Fluminense – UENF, Campos dos Goytacazes, RJ.

²School of Molecular and Microbial Sciences, University of Queensland, QLD, Austrália

Palavras Chave: complexo binuclear de manganês, modelo mimético, complexos de valência mista.

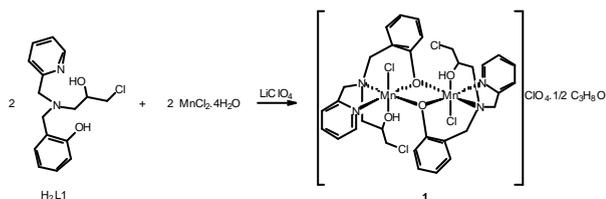
Introdução

O estudo da química de coordenação tem sido considerado essencial para o entendimento das características estruturais e funcionais das metaloenzimas, permitindo uma investigação sistemática dos fatores que afetam as suas reatividades.¹ 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.²

No intuito de desenvolver compostos de manganês que possam atuar como oxirredutases e/ou hidrolases sintéticas, apresentamos aqui a síntese e caracterizações iniciais do complexo Mn^{II}Mn^{III}(H₂L1)₂(Cl)₂.ClO₄.½C₃H₈O (**1**), sendo H₂L1 = N-(2-hidroxibenzil)-N-(2-piridilmetil)[(3-cloro)(2-hidroxi)]propilamina.

Resultados e Discussão

O complexo **1** foi obtido a partir da reação entre o ligante H₂L1, MnCl₂.4H₂O e LiClO₄ em isopropanol, conforme apresentado no Esquema 1.



Esquema 1. Síntese do complexo **1**.

O composto **1** foi caracterizado por espectroscopias de infravermelho e eletrônica, voltametria diferencial de pulso, condutivimetria, análise elementar de CHN e Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) (Tabela 1).

O espectro de infravermelho obtido para **1** é caracterizado principalmente pelas bandas do ligante, indicando que a coordenação dos íons metálicos aos ligantes foi efetiva. Além disso, bandas presentes entre 1121 e 1060 cm⁻¹ foram atribuídas ao perclorato, sugerindo, assim, a presença deste íon na estrutura do complexo.

A observação de dois processos anódicos na voltametria diferencial de pulso indica que **1** é um composto binuclear.

O dado de condutividade indica a presença de eletrólito (1:1) e concorda com os resultados de CHN, com a proposição de que o complexo apresenta uma molécula de perclorato como contra-íon, os ligantes encontrando-se na forma de fenolatos e cada um dos centros metálicos está ligado a um cloreto.

A espectroscopia eletrônica concorda com a presença de Mn^{III} na estrutura do complexo.³

Os estudos por RPE foram realizados em MeOH e em MeOH/H₂O (1:4), sendo observado em ambos os procedimentos um espectro de 6 linhas caracterizando também a presença do íon Mn^{II}.

Tabela 1. Dados de caracterizações físico-químicas do complexo **1**.

CHN %Exp.(Calc.)	C=43,59(43,76); H=4,39(4,23); N=6,20(6,19)
Condutividade (Acetonitrila)	40 ohm ⁻¹ .cm ² .mol ⁻¹
Espectroscopia eletrônica (Acetonitrila)	TC intraligante π→π*: 238 e 262 nm TCLM Cl → Mn ^{III} : 316 e 364 nm TCLM fenolato → Mn ^{III} : 459 nm
Diferencial de pulso (DMF)	E _{1/2} (V vs ENH): 0,355 e - 0,265

Conclusões

As caracterizações realizadas para o complexo **1** revelam que este trata-se de um complexo binuclear de Mn^{II}Mn^{III}. A presença de ligantes lábeis em sua estrutura o torna alvo de estudos de sua reatividade frente a substratos de enzimas de manganês, como as catalases e oxidases, o que o caracterizaria como um modelo funcional a estas metaloenzimas.

Agradecimentos

CNPq, FAPERJ, CAPES.

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

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

³ Kojima, T.; Leising, R. A.; Yan, S. e Que, Jr, L. *J. Am. Chem. Soc.*, **1993**, 115, 11328.