

# Estudo da interação de poliaminas com o íon tetraclorocadmato(II) por espectroscopia de UV, IV, RMN de $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ e $^{113}\text{Cd}$ e termogravimetria.

Bárbara L. Almeida\*(PG), Judith Felcman(PQ).

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Química – Rua Marquês de São Vicente, 225 – 22453-900 Rio de Janeiro – RJ

\* blalmeida@hotmail.com

Palavras Chave: cádmio(II), poliaminas, interações.

## Introdução

Estudos mostram que as interações entre ligantes aminados e o íon Cd(II) são vistas por espectroscopia de UV, pois a presença de interações neste sistema aumentam o valor da absorbância da banda de UV<sup>1</sup>. As interações podem ser vistas por espectroscopia de RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  pela comparação entre os sinais do ligante livre e na presença do íon Cd(II), que pode apresentar deslocamentos de até  $\delta = 0,85$  ppm para o próton e de  $\delta = 0,1$  ppm para o carbono, vizinhos à amina do ligante<sup>2</sup>. RMN de  $^{113}\text{Cd}$  fornece informações sobre o ambiente químico do Cd(II), pois qualquer mudança na esfera de coordenação pode causar um deslocamento do sinal de  $^{113}\text{Cd}$ <sup>3</sup>. O espectro de IV das aminas apresenta as absorções referentes ao grupo  $\text{NH}_3^+$ . A interação destes grupamentos a outras espécies faz com que ocorra um deslocamento da absorção<sup>4</sup>. Estudos com TG mostram que quando há formação de adutos é comum que a análise não apresente resíduos devido à sublimação do composto<sup>5</sup>. O objetivo do trabalho é estudar as interações de poliaminas protonadas com espécies aniónicas contendo metais, variando o tamanho da cadeia carbônica e o número de nitrogênios através de diferentes técnicas de caracterização. Este estudo é interessante uma vez que as poliaminas (Pa) lineares protonadas podem interagir com bioligantes na forma de gancho, ou estendida, além da possibilidade, de interagir por nitrogênios primários ou secundários.

## Resultados e Discussão

Foram estudados quatro sistemas a partir da reação do  $\text{CdCl}_2$  com os cloridratos de etilenodiamina(En), 1,3-diaminopropano(Tn), putrescina (Put) e espermidina (Spd) Os compostos foram isolados na proporção 1:1, em meio aquoso. A caracterização foi através de CHN, absorção atômica, TGA, IV, UV, RMN,  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  e  $^{113}\text{Cd}$ . A fórmula proposta para os compostos foi  $[\text{CdCl}_4][\text{Pa}]$ .

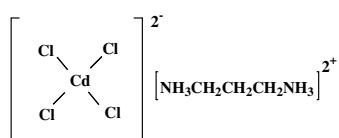


Figura 1: Estrutura do composto CdTn,(exemplo)

A curva TG/DTG mostra que para todos os compostos não ocorre formação de resíduo.

Tabela 1. Principais abs. no IV (KBr/polietileno cm<sup>-1</sup>)

Composto	v( $\text{NH}_3^+$ )	v(C-N)	v(CH <sub>2</sub> )	v(Cd-Cl)
CdEn/En	3015/ 3000	1025/ 1084	2918/ 2887	279
CdTn/Tn	3117/ 3008	1182/ 1190	2937/ 2879	281
CdPut/Put	3107/ 3087	1083/ 1114	2949/ 2941	281
CdSpd/Spd	3103/ 3028	1083/ 1162	2953/ 2950	277

Tabela 2. \*Variação do deslocamento de  $\delta$   $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  (vizinhos aos nitrogênios primários) em comparação com os sinais dos ligantes livres; sinais de  $^{113}\text{Cd}$  (ppm).

Composto	$\delta$ $^1\text{H}^*$	$\delta$ $^{13}\text{C}^*$	$\delta$ $^{113}\text{Cd}$	Especie
CdEn	-0,008	0,0346	235	$[\text{CdCl}_3(\text{H}_2\text{O})]\text{H}_2\text{En}$
CdTn	0,001	0,1011	145	$[\text{CdCl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]\text{H}_2\text{Tn}$
CdPut	-0,045	0,1179	273	$[\text{CdCl}_3(\text{H}_2\text{O})]\text{H}_2\text{Put}$
CdSpd	-0,153	0,02	171 236	$[\text{CdCl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]\text{H}_3\text{Spd}$ $[\text{CdCl}_3(\text{H}_2\text{O})]\text{H}_3\text{Spd}$

Tabela 3. Dados do UV ([ ] =  $10^{-3}\text{Mol/L}$ , solvente:  $\text{H}_2\text{O}$ )

Compostos	$\epsilon$ (mol <sup>-1</sup> .cm <sup>-1</sup> )	$\Delta\epsilon$	$\lambda$ (nm)	pH
CdEn/En	2040/ 1914	126	191/ 192	5,0
CdTn/Tn	2004/ 1619	385	190/ 191	5,1
CdPut/Put	1999/ 1735	264	191/191	6,1
CdSpd/Spd	1972/ 1842	130	191/192	5,7

## Conclusões

Os resultados mostram que as aminas interagem com o  $[\text{CdCl}_4]^{2-}$  através dos nitrogênios primários, ou seja, de forma estendida, independente do tamanho da cadeia e do número de nitrogênios protonados. A interação ocorre tanto no estado sólido, conforme resultados de TG e IV, como em meio aquoso, conforme resultados de UV e RMN.

## Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq, IME e FIOCRUZ.

<sup>1</sup> Bencini, A.; Bianchi, A.; *Et al, Polyhedron*, **2002**, 21, 1335.

<sup>2</sup> Guantieri, V.; Venzo, A.; *Et al, Inorg. Chim. Acta*, **2007**, In Press

<sup>3</sup> Guibin, M.; Fischer, A.; *Et al, Inorg. Chim. Acta*, **2005**, 328, 3165.

<sup>4</sup> Silverstein, Ident. Espect. de Comp. Orgânicos, 2000, LTC.

<sup>5</sup> Farias, R. F. de; In: Química de Coordenação, **2005**, Ed. Átomo,