

Estudo do comportamento da fosfocreatina como ligante tridentado: síntese e caracterização de um complexo de cobre(II) e fosfocreatina na presença de uma diamina

Judith Felcman¹ (PQ), Bárbara L. Almeida¹ (PG), Otávio Versiane² (PQ), Ana Lúcia Ramalho Mercê³, Antônio Sálvio Mangrich³.

¹Departamento de Química – PUC-Rio – Rua Marquês de São Vicente, 225 – 22453-900 Rio de Janeiro - RJ.

²CEFETEQ – RJ.

³Universidade Federal do Paraná.

felcman@rdc.puc-rio.br

Palavras Chave: Complexo, fosfocreatina, cobre (II).

Introdução

A fosfocreatina (PCr) é um ligante biológico que apresenta três grupos contendo átomos doadores em sua estrutura: o grupamento fosfato, o grupamento guanidino e o carboxilato. A presença destes três diferentes grupos possibilita variações na coordenação da PCr aos íons metálicos. Estudos em solução mostram que a PCr se coordena ao íon Cu(II) de forma bidentada, pelo nitrogênio do grupo guanidino e por um oxigênio. Entretanto os resultados não esclarecem se a coordenação ocorre pelo oxigênio do fosfato ou pelo oxigênio do carboxilato¹. Estudos realizados na presença de amina, mostram que em pH baixo, a PCr se coordena ao íon Cu(II) de forma bidentada e em pH mais alto a diamina se desprotona e coordena ao íon metálico². Nosso grupo realizou um estudo no estado sólido e os resultados indicaram que, diferentemente do comportamento em solução aquosa, a PCr se coordena ao íon Cu(II) de forma tridentada³.

O objetivo deste trabalho é a síntese e caracterização de um complexo de cobre fosfocreatina na presença da amina 1,3-diaminopropano no estado sólido, para a verificação se na presença de um outro ligante a PCr se coordena de forma bi- ou tridentada.

Resultados e Discussão

A síntese foi realizada em meio aquoso reagindo o Cu(OH)₂, PCr e o cloridrato de 1,3-diaminopropano na proporção 1:1:1. A reação forma uma suspensão. Após 4h de agitação à 35°C, adicionou-se KOH 0,1mol/L até pH 6,0. Obteve-se um sólido azul que foi lavado com água, etanol absoluto. O composto CuTnPcr foi caracterizado por: CHN, ponto de fusão, absorção atômica, TGA, IV e EPR. Os resultados foram comparados com os resultados do composto binário CuPcr já sintetizado, em que a PCr se apresentou coordenada de forma tridentada ao íon Cu(II)³. O ponto de fusão e o CHN se apresentaram muito similares. A curva de TG/DTG indicou inicialmente a saída de uma molécula de água tal qual o composto binário já sintetizado e a massa

residual dos dois compostos se apresentaram muito similares, conforme tabela 1.

Tabela 1. Comparação dos dados experimentais de TG e PF

Composto	P.F.°C	Resíduo TG
PCr	185 (dec)	40,7%
CuTnPcr	210(dec)	60,9%
CuPcr	212(dec)	59,1%

O espectro de IV e de EPR dos dois compostos também apresentaram similaridade. Os resultados sugerem a coordenação via nitrogênio e oxigênios do grupo fosfato e carboxilato, conforme já relatado para o composto binário CuPcr (Tab. 2 e 3).

Tabela 2. Parâmetros de EPR para os compostos

Composto	g	A	g _⊥	A _⊥
CuTnPcr	2,3550	170	2,0860	25
CuPcr	2,3550	170	2,0860	25

Tabela 3. Principais abs. no IV (KBr/poliet.cm⁻¹)

	N-H	vCOO ⁻	vPO	Cu-N	Cu-O
PCr	3411/3300	1653 1446	1169 984	---	---
CuTnPcr	3398 3205	1659 1205	1197 907	448	352, 324
CuPcr	3404	1658 1241	1182 916	450	300

Conclusões

A similaridade entre os resultados mostrou que o composto ternário CuTnPcr não foi obtido. Os dados indicam a formação de um composto binário de Cu(II) e PCr, coordenada como um ligante tridentado, com uma molécula de água ocupando a quarta posição na esfera de coordenação, mesmo na presença de um outro ligante. Estes resultados mostram a tendência da fosfocreatina em se comportar como um ligante tridentado frente ao íon Cu(II), e este tipo de coordenação possivelmente impede a coordenação do segundo ligante, evidenciando mais uma vez a diferença do comportamento deste ligante em solução aquosa e no estado sólido.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pelo suporte financeiro.

¹ Silva, J. A.; Felcman, J.; et al. *Inorg. Chim. Acta.* **2003**, 356, 155.

² Camacho, J. A., Felcman, *29^a Reunião Anual da Soc. Bras. de Química*, Águas de Lindóia- SP, **2006**

³ Felcman, J.; Almeida, B. L.; Versiane, O; Sousa, M.; Ramos, J. M.; Tellez, C.; *J. Biol. Inorg. Chem*, **2007**, 12, S119.