

## Síntese, Caracterização e Reatividade na Presença de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> dos complexos de 1,3-bis(aminoetil)-2-propanol com Co, Ni e Cu.

Bianca M. Pires (PG)<sup>1\*</sup>, Daniel M. Silva (IC)<sup>1</sup>, Lorenzo C. Visentin (PQ)<sup>1</sup>, Bernardo L. Rodrigues (PQ)<sup>1</sup>, Nakédia M.F. Carvalho (PQ)<sup>2</sup>, Roberto B. Faria (PQ)<sup>1</sup> – \*biamedpires@yahoo.com.br

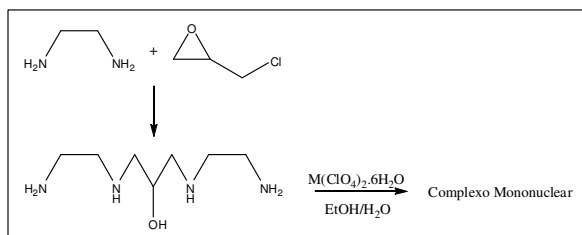
<sup>1</sup>Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ; <sup>2</sup>Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA.

Palavras Chave: oxidação, catalase, Michaelis-Menten.

### Introdução

A coordenação entre um metal e o grupo peróxido apresenta grande importância para os sistemas biológicos. São exemplos as enzimas metano monooxigenase (mmo) e a catalase, onde a ligação ocorre de forma diferente, sendo essencial para as suas diferentes funções. Na busca de modelos para estas metaloenzimas vários compostos de coordenação vêm sendo sintetizados, na busca por informações acerca desse tipo de ligação. Neste trabalho apresentamos a síntese e caracterização de dois complexos mononucleares inéditos com o ligante 1,3-bis(aminoetil)-2-propanol (LH), assim como uma nova rota sintética para o complexo conhecido [Cu(LH)](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>, bem como a reatividade dos três complexos perante o H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (ação de catalase) e na oxidação (ação de mmo) do ciclo-hexano.

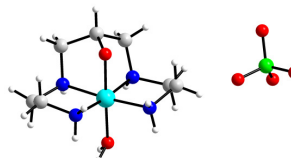
### Resultados e Discussão



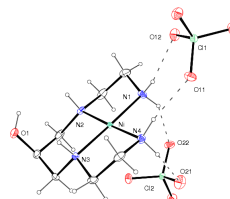
**Figura 1.** Rota de síntese (M = Co<sup>II</sup>, Ni<sup>II</sup> ou Cu<sup>II</sup>).

Os complexos foram sintetizados como indicado na Fig. 1 e caracterizados por difração de raios X. Na estrutura cristalográfica do complexo 1 (Fig. 2) observa-se a coordenação do Co com os quatro nitrogênios alifáticos, com o oxigênio do grupo propanol do ligante, além da coordenação com a H<sub>2</sub>O. As estruturas cristalográficas dos complexos 2 e 3 (Figs. 3 e 4) evidenciaram que a coordenação do ligante ocorreu apenas através dos nitrogênios.

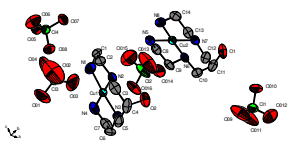
Os complexos foram testados como catalisadores na oxidação do ciclo-hexano, porém nenhum deles mostrou bons rendimentos de ciclo-hexanol e ciclo-hexanona (ver Tabela). Também foram testados na reação de desproporcionamento de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> e apenas os complexos 2 e 3 se mostraram bons catalisadores (ver Tabela), apresentando cinética Michaeliana.



**Figura 2.** Estrutura cristalográfica do complexo [Co(L)(H<sub>2</sub>O)](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> (1)



**Figura 3.** Estrutura cristalográfica do complexo [Ni(LH)](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> (2)



**Figura 4.** Estrutura cristalográfica do complexo [Cu(LH)](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> (3)

**Tabela 1.** Resumo da reatividade dos complexos.

	Oxidação do H <sub>2</sub> O (%)	Atividade de Catalase		
		V <sub>máx</sub> (mol dm <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> )	K <sub>M</sub> (mol dm <sup>-3</sup> )	k <sub>cat</sub> /K <sub>M</sub> (mol <sup>-1</sup> dm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> )
(1)	0	-	-	-
(2)	0	7,80 × 10 <sup>-7</sup>	2,75	9,45 × 10 <sup>-5</sup>
(3)	0,29	4,63 × 10 <sup>-6</sup>	17,36	8,87 × 10 <sup>-5</sup>

### Conclusões

A síntese e a caracterização de três complexos mononucleares com o ligante 1,3-bis(aminoetil)-2-propanol foram apresentadas. A reatividade dos complexos frente ao ciclo-hexano e ao de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> foi testada e apenas os complexos 2 e 3 apresentaram boa atividade de catalase.

### Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPERJ, FUJB.