

Síntese e caracterização de um novo complexo de Gd(III) com o ligante N doador TPEC

Sara E. Coelho (PG)^{*}, Geovana G. Terra (PG), Adailton J. Bortoluzzi (PQ).
saraecoelho@hotmail.com

Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Química, Laboratório de Bioinorgânica e Cristalografia,
Campus Universitário, CEP 88049-900, Florianópolis, Santa Catarina..

Palavras Chave: Lantanídeos, complexos de gadolínio, ligantes N doadores, hidrolases.

Introdução

Íons lantanídeos apresentam um efeito extraordinário na aceleração da velocidade de hidrólise de ésteres de fosfato. No entanto, são instáveis em meio alcalino e tóxicos a sistemas biológicos quando livres. Assim, a complexação desses íons se faz de extrema importância no desenvolvimento de nucleases artificiais. Na busca de novos complexos com íons lantanídeos que possam eficientemente catalisar a hidrólise de ligações ésteres de fosfato, apresentam-se no presente trabalho a síntese e a caracterização de um novo complexo de Gd(III).

Resultados e Discussão

O ligante **TPEC** foi sintetizado segundo metodologia descrita na literatura^(1,2) conforme esquema abaixo:

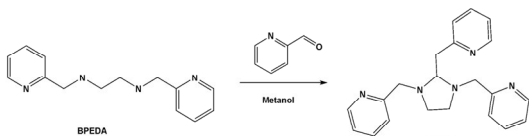


Figura 1. Rota sintética para obtenção do ligante TPEC.

O complexo **1** foi preparado conforme metodologia descrita⁽³⁾ e está mostrada a seguir:

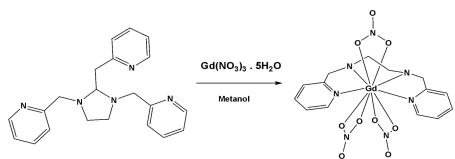


Figura 2. Síntese do complexo 1.

O complexo foi caracterizado por espectroscopia vibracional na região do infravermelho e difratometria de raios X. O espectro no infravermelho de **1** apresentou como principais bandas em cm^{-1} : ν (N-H) 3274, ν (C=N) 1587, ν (C-H_{ar} e C-H_{alif}) 3083-2871, ν (NO₃⁻) 1487-1322, δ (C-H_{py}) 770. Além disso, observa-se no espectro do complexo o aparecimento de uma banda em 3274 cm^{-1} , característica de estiramento N-H de amina secundária, que também é observada no espectro da amina BPEDA, percussora do ligante TPEC. Isto

é uma indicação de que o íon Gd(III) hidrolisa o anel imidazolino formando o complexo entre o íon metálico e o ligante BPEDA, o que foi confirmado com a resolução da estrutura cristalina por difratometria de raios X. A Figura 3 apresenta o espectro do complexo superposto ao do ligante TPEC e do ligante BPEDA.

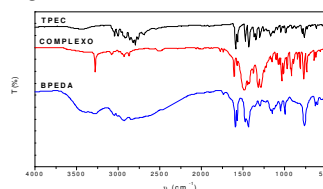


Figura 3. Sobreposição dos espectros no infravermelho.

A estrutura de raios X do complexo (Figura 4) revelam uma unidade simétrica [Gd^{III}BPEDA(NO₃)₃] de carga neutra com o íon gadolínio decaordenado. O poliedro de coordenação se aproxima a uma bipirâmide pentagonal distorcida, onde quatro das cinco posições equatoriais são ocupadas por átomos de nitrogênio do ligante BPEDA, e as três posições restantes são ocupadas por três grupos nitrato bidentados.

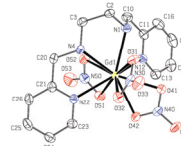


Figura 4. ORTEP do complexo 1.

Conclusões

A partir do ligante TPEC foi sintetizado um novo complexo mononuclear de gadolínio(III) o qual foi caracterizado por IV e sua estrutura de raios X resolvida. Através das análises pode-se observar a hidrólise do ligante TPEC provocada pelo íon metálico Gd(III). Onde o complexo obtido se deu pela complexação do íon metálico ao ligante BPEDA.

Agradecimentos

Ao CNPq, FAPESC, CAPES, INCT-Catálise, UFSC

¹ Neves, A., et al.; *Inorg. Chem.*, **1992**, *31*, 4749-4755.

² Hureau, C., et al.; *Inorg. Chem.*, **2008**, *47*, 9238-9247.

³ Coelho, S. E.; *Trabalho de Conclusão de Curso*, **2009**, Universidade Federal de Santa Catarina.