



Síntese, caracterização físico-química de compostos de coordenação de cobre(II) de relevância bioinorgânica

Raquel M. de S. N. Sampaio, Adolfo Horn Jr., Adailton J. Bortoluzzi, Roberto W. A. Franco, Christiane F. Horn

Compostos de coordenação de cobre(II) são de interesse como modelos para metaloenzimas antioxidantes como Catalase (CAT) e Superóxido Dismutase (SOD). Estas são cruciais na manutenção dos níveis de espécies reativas de oxigênio (ERO's), como peróxido de hidrogênio e radical superóxido, evitando processos indesejáveis como peroxidação lipídica e oxidação do DNA. Neste sentido, o presente trabalho tem como objetivo a síntese, caracterização e estudo da reatividade frente ao peróxido de hidrogênio e ao radical superóxido, de compostos de coordenação de cobre(II). Estes foram obtidos como sólidos cristalinos azuis pela reação entre os ligantes HL1 e HL2 (2-[piridin-2-ilmetilamino]etanol e 1[(piridin-2-ilmetil)amino]propan-2-ol, respectivamente) e os sais $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ e $[\text{Cu}(\text{OH}_2)_6]\text{ClO}_4$. Rendimento: 50-60%. Dados de análise elementar (C, H, N) sugerem as seguintes propostas: $[\text{Cu}(\text{HL1})\text{Cl}_2]$ **1**, $[\text{Cu}(\text{HL2})\text{Cl}_2]$ **2**, $[\text{Cu}(\text{HL1})_2](\text{ClO}_4)_2$ **3** e $[\text{Cu}(\text{HL2})_2](\text{ClO}_4)_2$ **4**, as quais estão em concordância com estudos de difração de raios-X de monocristal. Os espectros na região do infravermelho apresentam bandas típicas dos ligantes HL1 e HL2 na região de 1607 a 1450 cm^{-1} e ($\text{C}=\text{C}$ e $\text{C}=\text{N}$) e na região de 3142 a 3300 cm^{-1} , atribuída à vibração N-H. São observadas bandas intensas na região de 1090 a 1120 cm^{-1} , atribuídas ao contra-íon ClO_4^- presente nas estruturas dos compostos **3** e **4**. Espectros na região do UV-Visível, obtidos em água, indicam a presença de uma banda d-d em 600 (33), 595 (27), 601 (29) e 599 nm ($15\text{ dm}^3\text{ mol}^{-1}\text{ cm}^{-1}$), respectivamente. Resultados similares foram obtidos quando os compostos foram solubilizados em solução tampão fosfato (pH 7,8). Espectros de ESI(+)-MS indicam a presença dos cátions $[\text{Cu}(\text{HL1})\text{Cl}]^+$ (m/z 249), $[\text{Cu}(\text{HL2})\text{Cl}]^+$ (m/z 264), $[\text{Cu}(\text{HL1})(\text{L1})]^+$ (m/z 366) e $[\text{Cu}(\text{HL2})(\text{L2})]^+$ (m/z 394), respectivamente, para os compostos **1-4**. Espectros de EPR, obtidos em solução tampão fosfato mostram sinal típico de Cu(II) em simetria axial, de configuração eletrônica $3d^9$ com $S = \frac{1}{2}$ e $L = \frac{3}{2}$. A comparação com os espectros obtidos em água indicam que o tampão interfere na interação dipolo-dipolo para os compostos **1** e **2**, resultando em espectros mais resolvidos, provavelmente pela coordenação do fosfato ao centro de Cu(II) em virtude da labilidade dos ligantes cloro presentes nestes compostos.

Palavras-chave: Compostos de coordenação de cobre(II), Caracterização físico-química, Estrutura de Raios-X.

Instituição de fomento: CNPq.