

# Um Composto de Coordenação de Níquel II: Modelagem Sintética para Metaloenzimas.

Bruna Porto<sup>1\*</sup> (IC), Suzana C. Batista<sup>1</sup> (PQ)

bruna.porto@unisul.br

<sup>1</sup>Centro Tecnológico – Universidade do Sul de Santa Catarina – 88704-900 – Tubarão – SC.

Palavras Chave: composto de coordenação, síntese, níquel (II)

## Introdução

Entre as metaloenzima de interesse, está a urease, que catalisa a hidrólise da uréia em amônia e dióxido de carbono.<sup>1</sup> A origem da urease pode influenciar o seu peso molecular, sua estrutura, número e o tipo de subunidades, mas as sequências de aminoácidos do sítio ativo e o mecanismo catalítico são os mesmos em todas as ureases conhecidas.<sup>2</sup> Além disso, o seu funcionamento depende do níquel, sendo que em seu sítio ativo encontram-se dois íons deste metal.<sup>3,4</sup> Desta forma, o objetivo deste trabalho é obter um modelo sintético para esta metaloenzima contendo níquel e uréia na esfera de coordenação da molécula.

Assim, através deste estudo, um novo composto de Ni(II) com o ligante H<sub>3</sub>tea (tris(2-hidroxietil)amina) foi obtido e caracterizado.

## Resultados e Discussão

O composto de níquel (II) foi sintetizado em meio metanólico sob agitação e aquecimento a 60°C pela reação de 1,58 g (6 mmol) de NiSO<sub>4</sub>.6H<sub>2</sub>O e 0,8 mL (6 mmol) de trietanolamina. Posteriormente foi adicionado 0,18 g (3 mmol) de uréia. A partir da solução reacional originaram cristais verdes, sendo o rendimento da reação de 46,7%. A análise de condutividade elétrica revelou um valor de 192,5 µS, sendo 25°C a temperatura de referência. O espectro eletrônico (UV-vis) do composto com uma concentração de 6.10<sup>-2</sup>M (Figura 1).

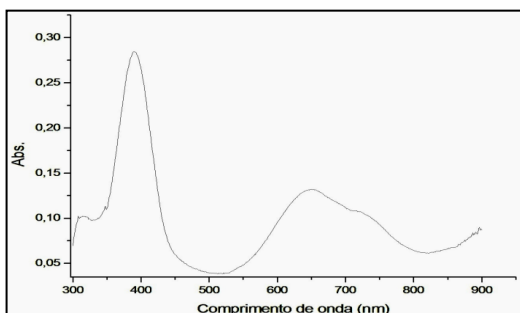


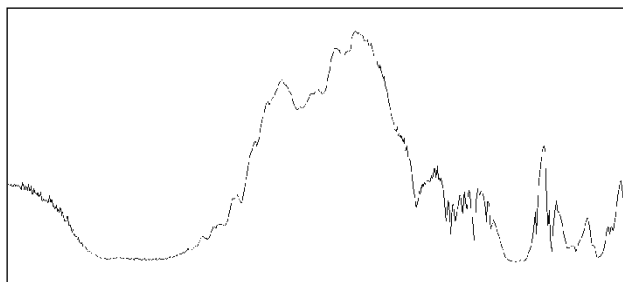
Figura 1. Espectro eletrônico do composto em metanol.

Fonte: Autor (2011).

O espectro apresentou um ombro em 710 nm ( $\epsilon = 1,67 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ) e bandas em  $\lambda = 650 \text{ nm}$  ( $\epsilon = 5,0 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ) e em  $\lambda = 390 \text{ nm}$  ( $\epsilon = 4,67 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ).

Através da caracterização por espectroscopia no infravermelho (Figura 2), apresentou as bandas<sup>5</sup> em 3252  $\text{cm}^{-1}$   $\nu(\text{O-H}_{\text{H}_2\text{O}})$ , 2843  $\text{cm}^{-1}$   $\nu(\text{C-H}_{\text{CH}_2})$ , 1335  $\text{cm}^{-1}$   $\delta(\text{O-H})$ , 1089  $\text{cm}^{-1}$   $\nu(\text{S-O})$ . A banda em 1089  $\text{cm}^{-1}$  evidência a presença do ânion  $\text{SO}_4^{2-}$  como contraíon.

Figura 2. Espectro no infravermelho em KBr.



Fonte: Autor (2011).

## Conclusões

O espectro no infravermelho indica para a formação do composto de coordenação. Enquanto que o Uv-vis revela a banda em 710 nm semelhante à urease.

## Agradecimentos

UNISUL, Art. 170, Curso de Engenharia Química.

<sup>1</sup> Bortoluzzi, J.A.; Catharino, R.R.; Eberlin, L.S.; Eberlin, M.N.; Fernandes, C.; Fim, L.; Júnior, A.H.; Neto, M.B.; Novak, M.A.; Szpoganicz, B. e Silva, M.S.. *Journal of Molecular Structure*.**2006**, 797, 154–164.

<sup>2</sup> Jedner, S.B.; Schwöppe, H.; Nimir, H.; Rompel, A.; Brown, D. A e Krebs B.. *Bioorganic Chemistry*. **2007**, 35, 233-242.

<sup>3</sup> Carlsson, C. e Nordlander, E.. *Bioinorganic Chemistry and Applications*. **2010**.

<sup>4</sup> Jedner, S.B.; Schwöppe, H.; Nimir, H.; Rompel, A.; Brown, D. A e Krebs B.. *Inorganica Chimica Acta*. **2002**, 340, 181-186.

<sup>5</sup>Nakamoto, K. *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds: Applications in Coordination, Organometallic, and Bioinorganic Chemistry*. New Jersey: John Wiley, **2009**.