

Estrutura Cristalina de um Composto de Coordenação Mononuclear de Níquel (II).

Bruna Porto^{1*} (IC), Suzana Cimara Batista¹ (PQ), Aline Locatelli² (PQ)

bruna.porto@unisul.br

¹Centro Tecnológico – Universidade do Sul de Santa Catarina – 88704-900 – Tubarão – SC

²Núcleo de Investigação de Triazenos e Complexos - UFSM - Universidade Federal de Santa Maria - Santa Maria - RS

Palavras Chave: *estrutura cristalina, esfera de coordenação, níquel (II).*

Introdução

A urease é uma metalohidrolase binuclear que contém íons de níquel (II) no seu sítio catalítico, apresentando-se como um catalisador biológico para a decomposição hidrolítica da uréia.¹ Esta metaloenzima apresenta-se como um sítio binuclear de níquel situados à uma distância de 3.5 Å entre si e separados por uma ponte carbamato. A geometria em torno do primeiro centro metálico de níquel é pseudotetraédrica, coordenado a dois átomos de nitrogênio (histidínicos) e a um átomo de oxigênio (lisina). Possivelmente é na quarta posição, provavelmente ocupada por uma molécula de água, que a uréia coordena-se durante a reação de catálise. A esfera de coordenação do segundo átomo de níquel, de geometria bipirâmide trigonal, é composta por dois nitrogênios histidínicos e por três oxigênios, sendo dois deles provenientes de resíduos dos aminoácidos aspartato e lisina e um proveniente de uma molécula de água.^{2,3}

Neste contexto, na tentativa de modelar o sítio ativo desta metaloenzima, a investigação das propriedades estruturais de complexos modelos torna-se relevante. Assim, neste trabalho está apresentada a estrutura cristalina de um composto de coordenação de Ni (II).

Resultados e Discussão

O composto de coordenação de níquel (II) (1) foi sintetizado e isolado na forma de cristais.⁴ A estrutura cristalina do complexo (1) apresenta o grupo espacial P21c (monoclínico), sendo que o átomo de níquel está em um ambiente de coordenação de geometria octaédrica, consistindo em um cátion mononuclear. A estrutura do cátion complexo está apresentada na figura 1. Os principais parâmetros cristalográficos estão relacionados na tabela 1. O ligante H₃tea está coordenado por intermédio de um átomo de nitrogênio amínico e três átomos de oxigênio do grupo álcool na forma protonada. A esfera de coordenação se completa com a ligação de duas moléculas de água. Os comprimentos das ligações entre Ni—N é 2,063(2) Å e entre níquel e as moléculas de água (Ni—O) são 2,0781(18) e 2,0912(17) Å.

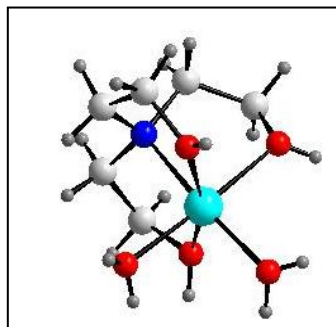


Figura 1. Estrutura cristalina do composto (1).
Fonte: Autores (2011).

Tabela 1. Parâmetros cristalográficos para (1).

| | |
|----------------------------|--|
| Fórmula Empírica | C ₆ H ₂₁ NiNO ₁₀ S |
| Massa Molecular | 357.94 g mol ⁻¹ |
| Sistema Cristalino | monoclínico |
| Grupo Espacial | P21c |
| V | 1383.35 (6) Å ³ |
| Dimensões da cela unitária | a = 7.4636 (2) Å b = 15.0257(3) Å c = 12.6363(3) Å |

Conclusões

A estrutura cristalina do composto mononuclear de Ni (II) contendo um ligante N,O doador mimetiza algumas características estruturais do sítio ativo da urease. O composto também apresenta duas moléculas de água coordenadas ao centro metálico, o que sugere que este complexo pode apresentar atividade catalítica tornando-se assim necessários estudos para determinar a sua eficiência catalítica. .

Agradecimentos

UNISUL, UFSM, Art. 170, Curso de Engenharia Química.

¹Piovezan, C.. Novos complexos binucleares homo e heterobimetalicos bioinspirados e seu estudo da reatividade em meio homogêneo e heterogêneo como modelos miméticos para as hidrolases. **2010**, 3, 55–73.

²Lippard, S. J.. *Science*. **1995**, 268, 996.

³Halcrow, M.; Christou, G.. *Chem. Rev.* **1994**, 94, 2421.

⁴Batista, S. C. e Porto, B. Um Composto de Coordenação de Níquel II: Modelagem Sintética para Metaloenzimas. *XIX Encontro de Química Região Sul*. **2012**. QI.