

1

Introdução

A vida é um processo complexo que transcende a uma definição científica exata. Ela depende das leis da natureza, que são imperativas; e delas não se pode escapar. Isto significa que o desenvolvimento de qualquer sistema vivo, ou parte desse sistema é inteiramente dependente da bioquímica na qual se desenvolve. Os componentes essenciais da bioquímica do ambiente se apresentam na forma de gêneros alimentícios, gases e água. A unidade básica da vida é a célula. Formas mais complexas de vida são organismos multicelulares, onde as células formam uma sociedade cuja saúde é dependente da atividade integrada de cada célula diferente do sistema. No corpo humano, há algo em torno de 10^{15} espécies de células [1].

A ciência avança a passos firmes na direção de pesquisas que abrem novas luzes sobre a prevenção de doenças, sobre a velhice e procura caminhos para a proteção da vida. A medicina ortomolecular justifica a introdução de antioxidantes no organismo para combater os radicais livres que são os grandes responsáveis pela destruição das células, gerando doenças e apressando o envelhecimento [2-3]. Portanto, os ramos da ciência que buscam valorizar e compreender melhor os processos metabólicos da vida deverão ser mais valorizados neste século.

Por outro lado, a alimentação do homem moderno, composta quase sempre de alimentos refinados é um fator de perda dos elementos essenciais. Esses elementos, na sua grande maioria, devem ser introduzidos de alguma forma, para manter suas quantidades ideais no organismo. Os compostos metálicos inorgânicos não são bem absorvidos pelo organismo. Os íons metálicos somente são absorvidos na forma de complexos com ligantes orgânicos.

Para justificar a importância deste trabalho, é necessário lembrar que as proteínas são constituintes importantes das células e que os aminoácidos formam as unidades básicas das proteínas. Portanto, estudos de formação de complexos estáveis de aminoácidos com íons metálicos, essenciais ou tóxicos, podem ser úteis tanto para a necessidade de introdução de elementos essenciais, como para a retirada de elementos tóxicos dos organismos. Os organismos vivos são ricos em substâncias que são, potencialmente, bons ligantes (moléculas orgânicas) e possuem, também, uma série de elementos metálicos. Por estes motivos, torna-se interessante estudar os complexos formados por elementos metálicos essenciais, benéficos ou tóxicos, com ligantes – que

são as próprias moléculas biológicas ou modelos que simulam algumas de suas propriedades.

As macromoléculas biológicas (proteínas, polipeptídios, carboidratos, nucleosídeos, nucleotídeos etc.) e seus derivados ou produtos de decomposição (grupos amino, guanidino, histidina etc.) contém átomos doadores, sendo, portanto ligantes em potencial que podem participar de processos de coordenação com íons metálicos e de protonação ou desprotonação. A protonação ou coordenação metálica diminui a densidade eletrônica dos grupos doadores (ou átomos doadores) participantes no processo, alterando também a estrutura eletrônica dos grupos adjacentes da molécula, o que pode resultar em modificações no seu comportamento químico (estabilidade, por exemplo) [4].

Em moléculas contendo diversos átomos doadores, os processos de condensação podem inclusive, modificar a configuração ou conformação das espécies em solução através da formação, por exemplo, de ligações de hidrogênio ou em consequência do efeito “template” [4].

Em análise qualitativa inorgânica, utilizam-se amplamente as reações que levam à formação de complexos: um íon complexo é constituído de um átomo central (íon) e vários ligantes intimamente acoplados a ele. As quantidades relativas desses componentes num complexo estável parecem seguir uma estequiometria bem definida, embora isso não possa ser interpretado dentro do conceito clássico de valência [5].

O número de coordenação representa o número de espaços disponíveis em torno do átomo central na denominada esfera de coordenação, cada um dos quais pode ser ocupado por um átomo doador do ligante (monodentado) [5].

Ligantes diferentes têm capacidades diferentes para desdobrar os orbitais d, do cátion, em sub-níveis de energia. Através da teoria do campo ligante e também por meio de medidas espectrais e magnéticas, é possível prever tal capacidade.

É possível utilizar programas computacionais para os cálculos de constantes de estabilidade em sistemas complexos a partir de dados experimentais. Então, a partir do conhecimento prévio das constantes de formação dos complexos dos íons metálicos e dos ligantes, de suas concentrações e do pH do meio, podem-se usar modelos simulados de computador para determinação quantitativa destas espécies presentes em sistemas biológicos. Escolheu-se neste trabalho estudar, em solução, complexos ternários dos íons Co(II) e Ni(II), com os aminoácidos; glicina (Gly), serina (Ser), ácido aspártico (Asp) e ácido guanidoacético (Gaa). Esse estudo visa complementar estudos já realizados em nosso laboratório, tanto em solução quanto em estado sólido. Um dos principais objetivos do estudo é analisar as interações que possam ocorrer na coordenação de sistemas biologicamente ativos.

1.1.**Objetivos do presente estudo**

Estudar os compostos ternários de Co(II) e Ni(II) com os aminoácidos glicina, serina, ácido aspártico e ácido guanidoacético. Para isso será necessário efetuar titulações potenciométricas dos aminoácidos Gly, Ser, Asp e Gaa e das soluções contendo metal – ligante (complexos binários e ternários). Determinar as constantes de formação dos ligantes e dos complexos e as constantes de interação entre os ligantes (L_1L_2). Construir gráficos de distribuição de espécies dos sistemas binários e ternários de Co(II) e de Ni(II) em função do pH. Determinar por meio de espectroscopia de UV-Vis, as bandas de transferência de carga e as bandas de transição eletrônica (d-d) do Co(II) e Ni(II) nos sistemas binários e ternários, varrendo o pH. Realizar estudos espectroscópicos de EPR nos sistemas binários e ternários.