

REUNIAO ANUAL DA SBPC, 37, Belo Horizonte - MG,
1985. Resumo. Ciência e Cultura. Suplemento,
37 (7): 387, jul. 1985.

22-D.2.2 ESTUDO DE PERCLORATO DE {5,10,15,20 TETRAKIS(4-METILPIRIDIL)PORFIRINA}FERRO III- FeTMPyP (ClO₄)₅ COMO CATALISADOR MODELO DE CITOCROMO P-450. Yassuko Iamamoto, Shirley Nakagaki, Gianluca C. Azzeilini e Osvaldo Baffa Filho. (Deptº de Química, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP) e Otacírio R. Nascimento. (Instituto de Física e Química de São Carlos - USP).

O sistema modelo de FeTMPyP-Iodosobenzênio foi testado previamente com resultados de hidroxilação do ciclohexano da ordem de 11%. Objetivando elucidar o mecanismo catalítico do sistema modelo foram feitos estudos preliminares utilizando a técnica de ESR (Ressonância de Spin Eletrônico) para detectar as possíveis espécies intermediárias durante a reação (XVI Congresso Latino-Americano de Química- Livro de Resumos p.334, R.J. outubro/84). A reação é feita à 25°C e a seguir a mistura é congelada a -80°C, nessa temperatura a reação cessa. Controlando-se o tempo de reação à temperatura ambiente pode-se ter informações sobre os intermediários detectáveis por ESR. Para uma reação realizada na seguinte ordem de adição: ClO + metanol + ciclohexano + FeTMPyP(ClO₄)₅, observa-se que após 15s de reação o espectro de ESR revela a existência de dois sinais de Fe³⁺, um característico de spin alto ($S \pm 5/2$) com valores de $g_x = 7,72$, $g_y = 5,79$ e $g_z = 2,00$ e outro com $g_o = 4,66$. Após dois minutos de reação, o sinal devido à configuração de spin alto desaparece e ocorre um aumento de intensidade do sinal em $g_o = 4,66$. Finalmente após 15 minutos observa-se novamente um sinal com $g = 6,36$ ($S = 5/2$) com simetria axial e na intensidade que o primeiro espectro; já o sinal em $g_o = 4,66$ permanece inalterado. Foi feito ainda controle através de espectros no visível do catalisador e constatamos recuperação da porfirina original ~90% após a reação com λ_{max} de 412nm, 584nm e 630nm(ombro). Estes dados sugerem que numa primeira etapa há formação de uma espécie intermediária que envolve ferro III numa simetria de campo cristalino rômica, a seguir este sinal é convertido no sinal com $g_o = 4,66$ e posteriormente tem-se a recuperação da forma alto spin, mas agora com simetria axial. Os diversos caminhos para que a reação se processe estão sendo estudados à luz destes resultados.

00001517

Campo	Dado
*****	Documento 1 de 1
No. Registro	000748909
Tipo de material	TRABALHO DE EVENTO-RESUMO PERIODICO - NACIONAL
Entrada Principal	Yamamoto, Y
Título	Estudo de perclorato de 5,10,15,20 tetretkis (4-metilpiridini porfirina) ferro iii - fetmpyp ' ('cl"o ind.2') IND.5' como catalisador de citromo p-450.
Imprensa	, 1985.
Descrição	p.387.
Autor Secundário	Nakagaki, S (*)
Autor Secundário	Alzellini, G C (*)
Autor Secundário	Baffa, Oswaldo
Autor Secundário	Nascimento, Otaciro Rangel
Autor Secundário	Reunião Anual da SBPC (37. 1985 Belo Horizonte)
Fonte	Ciencia e Cultura, v.37, n.7 supl., p.387, jul. 1985
Unidade USP	IF -- INST DE FÍSICA
Unidade USP	IFQSC-F -- INST DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
Unidade USP	FFCLRP -- FAC DE FILOSOFIA, CIÊN LETRAS DE RIBEIRÃO PRETO
Localização	IFSC PROD001517