

RESOLUÇÃO - Exercício 6

Química Bio-Inorgânica 2022

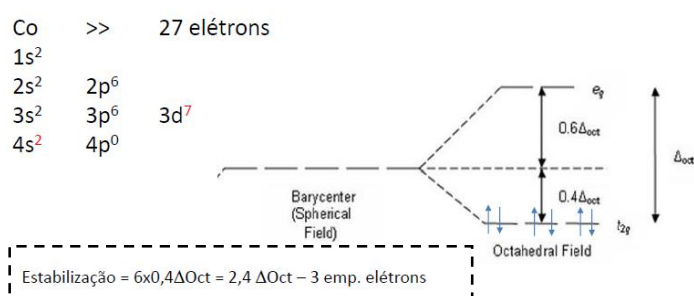
As cobalaminas são complexos que contém o íon do metal de transição Cobalto. São moléculas que atuam como cofatores de muitas enzimas. No exemplo abaixo, uma cobalamina é formada por Co^{3+} e 5 bases nitrogenadas, além de um íon Cianeto (CN^-). Todos estes ligantes podem ser considerados de campo forte, dando origem a estruturas octaédricas como indicado na figura abaixo.

a) Com base na teoria do campo cristalino, explique porque o íon Co^{3+} das cobalaminas ocorre predominantemente na forma octaédrica e não tetraédrica. Considere todos os ligantes sendo de campo forte para explicar sua resposta. Mostre cálculos de estabilidade para justificar sua resposta.

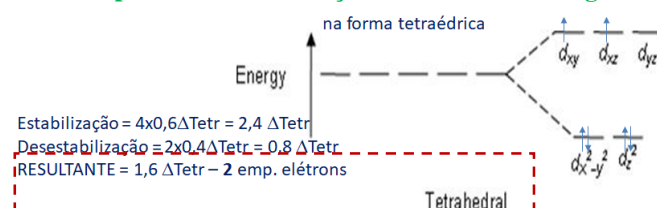
R: O íon Co^{3+} possui 6 elétrons em orbitais “d”.

Com ligantes de campo forte, na forma octaédrica, apresentaria a distribuição de elétrons indicada abaixo e a correspondente estabilização do íon devido à degeneração de energia dos orbitais “d”

O metal Co (Cobalto) >> $\text{Co}^{3+} = d^6 4s^0$

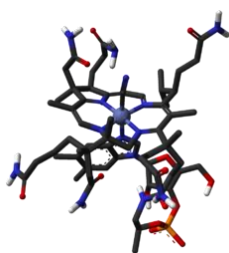


Com ligantes de campo forte, na forma tetraédrica, apresentaria a distribuição de elétrons indicada abaixo e a correspondente estabilização do íon devido à degeneração de energia dos orbitais “d”



PORTANTO, o Co^{3+} é significativamente mais estável na forma octaédrica

b) Considerando a estabilidade do íon baseada somente nos níveis de energia dos orbitais “d”, preveja se a estrutura abaixo seria mais estável com Co^{3+} ou com Co^{2+} . Mostre cálculos de estabilidade para justificar sua resposta.



R: A forma Co^{3+} seria mais estável, pois possui 6 elétrons “d”, todos nos orbitais degenerados de menor energia, computando uma estabilização de $2,4 \Delta_{\text{Oct}}$, conforme indicado no item “a”.

Já a forma Co^{2+} apresenta 7 elétrons “d”. Com isso, um elétron, necessariamente, ocupará um orbital “d” de maior energia, ocasionando uma estabilização resultante do campo octaédrico menor >>

>> Est. Resultante = $2,4 - 0,6 (\Delta_{\text{Oct}}) = 1,8 \Delta_{\text{Oct}}$.