

## RESOLUÇÃO - Exercício 6

### Química Bio-Inorgânica 2022

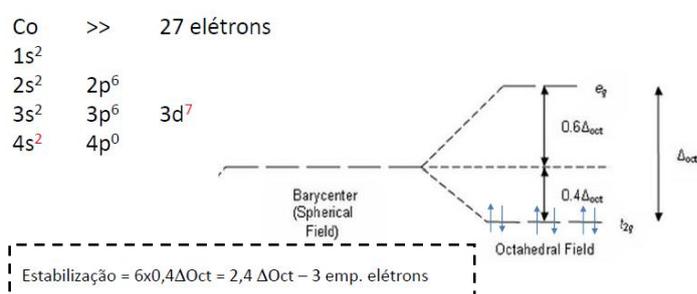
As cobalaminas são complexos que contém o íon do metal de transição Cobalto. São moléculas que atuam como cofatores de muitas enzimas. No exemplo abaixo, uma cobalamina é formada por  $\text{Co}^{3+}$  e 5 bases nitrogenadas, além de um íon Cianeto ( $\text{CN}^-$ ). Todos estes ligantes podem ser considerados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

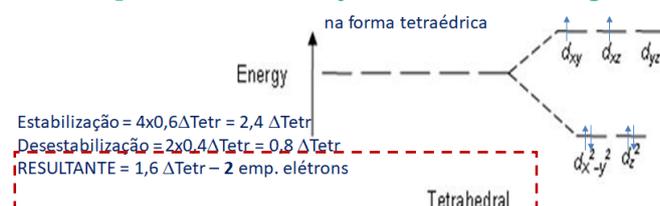
**R:** O íon  $\text{Co}^{3+}$  possui 6 elétrons em orbitais “d”.

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

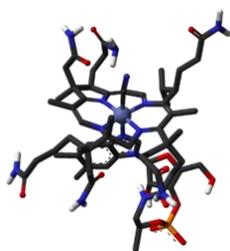


Com ligantes de campo forte, na forma tetraédrica, apresentaria a distribuição de elétrons indicada abaixo e a correspondente estabilização do íon devido à degeneração de energia dos orbitais “d”



**PORTANTO, o  $\text{Co}^{3+}$  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  $\text{Co}^{3+}$  ou com  $\text{Co}^{2+}$ . Mostre cálculos de estabilidade para justificar sua resposta.



**R:** A forma  $\text{Co}^{3+}$  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  $\text{Co}^{2+}$  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 =  $2,4 - 0,6 (\Delta_{\text{Oct}}) = 1,8 \Delta_{\text{Oct}}$ .