



Desenvolvimento de novos ligantes binucleantes e estudo da reatividade com zinco para formação de catalisadores miméticos das fosfatases

Luel Maximiano de Oliveira Costa, Christiane Fernandes, Adolfo Horn Jr.

As enzimas que catalisam reações de hidrólise de ésteres de fosfato são conhecidas como fosfatases, sendo que algumas apresentam íons metálicos nos seus sítios ativos, sendo então denominadas de metaloenzimas. Exemplos de tais enzimas incluem a glicerofosfodiesterase (GpdQ) proveniente da *Enterobacter aerogenes* e a agente degradante de organofosfato (OpdA), a qual é isolada da *Agrobacterium radiobacter*. Ambas apresentam zinco nos seus sítios ativos. Buscando obter catalisadores que apresentem atividade semelhante a tais enzimas, este projeto está voltado ao desenvolvimento de compostos de coordenação de zinco e estudo da atividade de fosfatase dos mesmos. Nesta primeira etapa desenvolvemos uma rota sintética para a síntese de dois novos ligantes, sendo eles: 3,3'-((3-(bis(piridin-2-ilmetil)amino)-2-hidroxiopropil)azanodi-il)dipropanamida (HL1) e o ((3-(bis(piridin-2-ilmetil)amino)-2-hidroxiopropil)amino)propanamida (HL2). O ligante HL1 possui como grupos coordenantes duas piridinas, duas aminas terciárias, um grupo álcool e duas amidas. Já o ligante HL2 possui duas piridinas, duas aminas terciárias, um grupo álcool e uma amida. Os ligantes sintetizados foram caracterizados por espectroscopia de infravermelho e RMN ^1H e ^{13}C . A reação de HL1 com $\text{Zn}(\text{ClO}_4)_2$ na presença de acetato de sódio levou a obtenção de um sólido branco, porém o mesmo não ocorreu com o ligante HL2. O composto de zinco isolado com o ligante HL1 foi caracterizado até o momento por espectroscopia de infravermelho e espectrometria de massas com ionização por electrospray (ESI-(+)-MS). A análise de infravermelho revela a presença do ligante na estrutura do composto, bem como dos íons acetato e perclorato. A análise de (ESI-(+)-MS) indica a formação de um composto binuclear de zinco, revelando a capacidade binucleante do ligante HL1. A obtenção de um composto binuclear de zinco é de suma importância para que o mesmo apresente atividade de fosfatase. Estudos posteriores estão programados para confirmar a estrutura do composto de zinco (RMN, CHN, raios-X). Após a realização destas investigações, estudos da atividade catalítica serão realizados frente a ésteres de fosfato para averiguar a atividade catalítica do composto.

Palavras-chave: fosfatases, complexos de zinco, ligante binucleante.

Instituição de fomento: CNPq, UENF