



Síntese e caracterização de um novo composto tetranuclear de zinco com relevância para o estudo de atividade catalítica em reações de hidrólise de ésteres de fosfato

Iago de S. Reis, Christiane Fernandes, Jackson A. L. C. Resende, Adolfo Horn Jr.

Uma ampla classe de enzimas que propicia a hidrólise de ésteres de fosfato é chamada de fosfatase. Diversas destas enzimas possui íons metálicos em seu sítio ativo. São exemplos desses catalisadores biológicos a agente degradante de organofosfato (OpdA), encontrada na *Agrobacterium radiobacter* e as glicerofosfodiesterases (GpdQ), encontradas na *Enterobacter aerogenes*, sendo as mesmas possuidoras de zinco no sítio ativo. Elas são capazes de degradar organofosfatos tóxicos, como pesticidas comerciais e até mesmo agentes de armas químicas. Na busca para a obtenção de compostos sintéticos miméticos das fosfatases, é apresentado neste trabalho a síntese e caracterização de um novo ligante assimétrico: 3,3'-((2-hidroxi-3-((2-hidroxibenzil)(piridin-2-ilmetil)amino)propil)azanodiil) dipropanamida (H₂L1). O ligante H₂L1 foi caracterizado por espectroscopia na região do infravermelho (IV) e ressonância magnética nuclear (RMN) ¹H, ¹³C e ¹⁵N e apresenta-se como um sólido branco com ponto de fusão (PF) de 125 °C. A reação de H₂L1 com [Zn(OH₂)₆](ClO₄)₂ (1:2) na presença de acetato de sódio resultou em um sólido branco com PF de 222 °C, cuja recristalização permitiu o isolamento de monocristais apropriados para resolução da estrutura molecular por difração de raios X. O composto de zinco também foi caracterizado por IV, RMN ¹H, ¹³C, ¹⁵N e espectrometria de massas (ESI-(+)-MS). Todas estas técnicas concordam com a obtenção de um composto tetranuclear de zinco contendo duas moléculas do ligante H₂L1, com a fórmula [Zn₄(H₂L1)₂(OH₂)₂](ClO₄)₄·4(H₂O). Dois átomos zinco têm o mesmo ambiente de coordenação, ligados a uma amina terciária, a um grupo piridina, a dois oxigênios fenoxo e a um grupo alcoxo. Os outros átomos de zinco, também com mesmo ambiente de coordenação, são coordenados por dois grupos amidas, uma amina terciária, um grupo alcoxo e uma molécula de água. A presença destas moléculas de água é de relevância para a obtenção de nucleófilos (OH⁻) capazes de promover a hidrólise de ésteres de fosfato.

Palavras-chave: Fosfatases, Complexo de zinco, Ligante assimétrico.

Instituição de fomento: CNPq, UENF.