



Síntese, caracterização e avaliação da atividade mimética funcional à metaloenzima superóxido dismutase (SOD) de compostos de coordenação de cobre(II)

Raquel M. de S. N. Sampaio, Christiane F. Horn, Adolfo Horn Jr., Adailton J. Bortoluzzi, Roberto W. A. Franco

Atualmente, há um crescente interesse na síntese de compostos de coordenação de cobre(II), pois este íon metálico integra o sítio ativo de importantes metaloenzimas, como a catalase (CAT) e superóxido dismutase (SOD), as quais são cruciais na regulação dos níveis de espécies reativas de oxigênio (EROs). Assim, o presente trabalho tem como objetivo a síntese, caracterização físico-química e estudo cinético frente ao radical superóxido de quatro compostos de coordenação de cobre(II), contendo os ligantes 2-(piridin-2-ilmetilamino)etanol (HL1) e 1-(piridin-2-ilmetilamino)propan-2-ol (HL2). Dados de análise elementar (C, H, N) confirmam as seguintes propostas: $[\text{Cu}(\text{HL1})\text{Cl}_2]$ **1**, $[\text{Cu}(\text{HL2})\text{Cl}_2]$ **2**, $[\text{Cu}(\text{HL1})_2](\text{ClO}_4)_2$ **3** e $[\text{Cu}(\text{HL2})_2](\text{ClO}_4)_2$ **4**, as quais estão em concordância com estudos de difração de raios X de monocristal, realizados para todos os compostos. Os espectros na região do infravermelho apresentam bandas típicas dos ligantes HL1 e HL2 na região de 1607 a 1450 cm^{-1} e (C=C e C=N) e na região de 3142 a 3300 cm^{-1} , atribuída à vibração N-H. São observadas bandas intensas na região de 1090 a 1120 cm^{-1} , atribuídas ao contra-íon ClO_4^- presente nas estruturas dos compostos **3** e **4**. Espectros de ESI(+)-MS indicam a presença dos cátions $[\text{Cu}(\text{HL1})\text{Cl}]^+$ (m/z 249), $[\text{Cu}(\text{HL2})\text{Cl}]^+$ (m/z 264), $[\text{Cu}(\text{HL1})(\text{L1})]^+$ (m/z 366) e $[\text{Cu}(\text{HL2})(\text{L2})]^+$ (m/z 394) para os compostos **1–4**. Espectros na região do UV-Visível, obtidos em água, indicam a presença de transições $d-d$ em 600 (33), 595 (28), 594 (29) e 599 nm ($15\text{ dm}^3\text{ mol}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$). Resultados similares foram obtidos quando os compostos foram solubilizados em solução tampão fosfato (pH 7,8). Espectros de EPR, obtidos em solução tampão fosfato mostram sinal típico de Cu(II) em simetria axial, com configuração eletrônica $3d^9$ e $S = \frac{1}{2}$. Em relação à atividade mimética à SOD, foram realizados estudos cinéticos dos complexos **1–4**, empregando-se o sistema xantina/xantina oxidase na presença do indicador NBT (nitroazul de tetrazólio), a fim de avaliar a inibição da formação de formazan à 50%, obtendo-se o IC_{50} . Os compostos **1–4** apresentaram os seguintes valores de IC_{50} : 0,099; 0,108; 0,205 e 0,326 $\mu\text{mol}\cdot\text{dm}^{-3}$. O complexo **1** é o que apresenta melhor atividade mimética à SOD, quando comparado com o valor da IC_{50} da SOD bovina ($0,042\text{ }\mu\text{mol}\cdot\text{dm}^{-3}$).

Palavras-chave: Superóxido dismutase (SOD), compostos de coordenação, caracterização físico-química.

Instituição de fomento: CAPES, CNPq, UENF.