Síntese de novos compostos de zinco como modelos sintéticos das fosfatases

Iago de S. Reis, Christiane Fernandes, Adolfo Horn Jr.

Fosfatase é uma ampla classe de enzimas que promovem a hidrólise de ésteres de fosfato. As glicerofosfodiesterases (GpdQ), encontradas em *Enterobacter aerogenes* e a agente degradante de organofosfato (OpdA), encontrada na *Agrobacterium radiobacter* são exemplos desses catalisadores biológicos. Elas possuem íons metálicos nos sítios ativos, sendo chamadas de metalofosfoesterases. Têm papel importante na degradação de organofosfatos tóxicos: diversos pesticidas comerciais e até mesmo agentes de guerra química. As mesmas são binucleares, logo, desenvolveu-se a rota sintética para a obtenção de ligantes binucleantes não simétricos, com o objetivo de obter compostos dinucleares de zinco nos quais os íons Zn^{2+} apresentem acidez de Lewis diferenciada. O ligante sintetizado, 3,3'-((2-hidroxi-3-((2-hidroxibenzil)(piridin-2-ilmetil)amino)propil)azanodiil)dipropanamida (H2L1), possui como grupos quelantes um fenol, uma piridina, dois grupos amínicos terciários, dois grupos amidas e uma grupo álcool. Este ligante apresenta-se como um sólido branco, de ponto de fusão de 125 °C e foi caracterizado por espectroscopia de infravermelho e RMN ^{1}H e ^{13}C. A reação de H2L1 com $Zn(ClO_4)_2$ na presença de acetato de sódio resultou na obtenção de uma sólido branco com ponto de fusão de 239 °C. O composto foi analisado por espectroscopia de infravermelho e por espectrometria de massas com ionização por electrospray, indicando a formação de um composto binuclear de zinco. Os dados obtidos até o momento permitem concluir que a rota de síntese utilizada foi adequada para a síntese do ligante H2L1 e que o mesmo também se mostrou adequado para a síntese de compostos binucleares de zinco, apresentando assim a mesma nuclearidade do sítio ativo das enzimas GpdQ e OpdA. Outras análises estão em andamento para caracterizar a pureza do composto de zinco obtido, o qual será futuramente avaliado quanto à capacidade de promover a hidrólise de ésteres de fosfato, sendo esta a reação catalítica promovida pelas enzimas citadas.

Palavras-chave: Fosfatases, compostos de zinco, ligante binucleante.

Instituição de fomento: CNPq, FAPERJ, UENF.