



Síntese e caracterização de um novo ligante heptacoordenante e seu respectivo composto binuclear de zinco visando o estudo da atividade de fosfatase

Luel M. O. Costa, Christiane Fernandes, Jackson A. L. C. Resende, Adolfo Horn Jr.

Em alguns sistemas vivos a hidrólise de ésteres de fosfato ocorre em frações de segundos. Isso se deve a ação de enzimas denominadas de fosfatases. Algumas dessas enzimas possuem íons metálicos em seus sítios ativos, como as enzimas glicerofosfodiesterases (GpdQ) e a agente degradante de organofosfato (OpdA). Ambas enzimas foram capazes de degradar ésteres de fosfato tóxicos. O presente trabalho teve como objetivo obter um catalisador que apresente atividade mimética a tais enzimas. Para tal planejou-se e sintetizou-se o ligante bioinspirado heptacoordenante inédito 3,3'-((3 - (bis(piridin-2-il metil)amino)-2-hidroxi)propil)azanedi-il)dipropanamida (HL1), que foi posteriormente utilizado para a obtenção de um novo composto de coordenação de zinco ($[Zn_2(L1)(OAc)](ClO_4)_2 \cdot (H_2O)_{0,5}$), que terá sua atividade de fosfatase estudada. O ligante HL1 possui como grupos coordenantes duas piridinas, duas aminas terciárias, um grupo álcool e duas amidas. Os produtos foram caracterizados pelas técnicas de: Ressonância magnética nuclear (RMN) 1H , ^{13}C , ^{15}N , HSQC, HMBC, COSY, ponto de fusão (PF), infravermelho (IV), análise elementar (CHN), espectrometria de massas com ionização por electrospray (ESI) e difração de raios X de monocristal. As técnicas utilizadas revelaram a obtenção de um composto binuclear de zinco, onde os dois íons metálicos apresentam-se pentacoordenados. Os átomos de zinco apresentam ambiente de coordenação distintos, devido à assimetria do ligante. Assim, um átomo de zinco apresenta um ambiente de coordenação N_3O_2 , enquanto no outro átomo de zinco o ambiente é NO_4 . Os dois átomos de zinco estão conectados por pontes alcóxido e acetato. A formação de um composto binuclear com essas características estruturais e ambiente de coordenação insaturado, onde os átomos de zinco encontram-se pentacoordenados, é de grande relevância para o estudo da atividade de fosfatase, uma vez que em solução com condições adequadas de pH, moléculas de água poderão se coordenar ao zinco gerando espécies nucleofílicas (OH^-), capazes de promoverem a hidrólise de ésteres de fosfato.

Palavras-chave: Ésteres de fosfato, Miméticos, Complexo de zinco.

Instituição de fomento: CNPq, FAPERJ, UENF