



Síntese e caracterização de um novo silicato funcionalizado visando o desenvolvimento de catalisador heterogêneo mimético das fosfatases

Quézia de Souza Jesus Pessanha, Marco Antônio Guimarães Barbosa Gomes, Christiane Fernandes, Adolfo Horn Jr.

As fosfatases são enzimas que promovem a hidrólise de ésteres de fosfato. Várias destas enzimas possuem íons metálicos em seus sítios ativos, como por exemplo a glicerofosfodiesterases (GpdQ) e a agente degradante de organofosfato (OpdA). Estudos são realizados visando o desenvolvimento de sistemas capazes de mimetizar estas enzimas. Porém, a catálise heterogênea ainda não é um tema muito abordado, se comparada à homogênea. A catálise heterogênea possui várias vantagens sobre a homogênea, como separação fácil, reciclagem eficiente do catalisador e prevenção de agregação molecular ou reações autodestrutivas bimoleculares. O ligante N,N',N'-tris-(2-piridilmetil)-1,3-diaminopropan-2-ol (L1), quando complexado com zinco, gera um composto com atividade catalítica de fosfatase. Este trabalho visa à imobilização deste ligante na superfície de uma matriz sólida (silicato), para testar um possível aumento na eficiência e seletividade do seu complexo de zinco. A rota sintética consistiu na síntese do ligante L1, ligação do mesmo ao agente sililante (3-glicidiloxipropil)trimetoxisilano (GPTMS), seguido da condensação do silanol em meio básico. O composto de zinco foi sintetizado pela adição do ligante ancorado com equivalente molar do perclorato de zinco hexahidratado ($\text{Zn}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$). A sílica SiL1 e seu derivado metalado ZnSiL1 foram caracterizados por espectroscopia na região do infravermelho (IV) e análise elementar de carbono, hidrogênio e nitrogênio (CHN). No IV do composto SiL1 verifica-se a ausência de uma banda em 3743 cm^{-1} referentes ao silanol livre e a presença de sinal entre $1080\text{-}800 \text{ cm}^{-1}$ referentes às vibrações simétricas e assimétricas da unidade Si-O-Si, indicando a condensação dos metoxisilanos do GPTMS em ligações siloxisilano com núcleo do tipo T⁸. Com os dados do CHN, foi possível propor a fórmula química $\text{C}_{126}\text{H}_{210}\text{N}_{20}\text{O}_{45}\text{Si}_8$. Os espectros de IV do complexo de Zinco apresentaram bandas similares ao ligante ancorado, além da banda na região de $1000\text{-}1200 \text{ cm}^{-1}$ referente ao perclorato. E por meio do CHN foi feita a proposta da fórmula $\text{C}_{126}\text{H}_{208}\text{Cl}_8\text{N}_{20}\text{O}_{76}\text{Si}_8\text{Zn}_4$. Análises posteriores serão realizadas para confirmar a estrutura desses compostos seguido dos estudos para avaliação da sua atividade catalítica frente a ésteres de fosfato.

Palavras-chave: Catalisador biomimético, Fosfatase, Organosilicatos.

Instituição de fomento: CNPq, UENF.