

Estudo da interação de derivados da 2-fenil-2,3-diidronafto[1,2-b]furano-4,5-diona com ASH por espectroscopia de fluorescência.

Cosme Henrique Coêlho dos Santos de Oliveira* (PG)^{1,4}, Henrique Dias de Deus (IC)¹, Edgar Schaeffer (IC)¹, Francisco de Assis da Silva (PQ)¹, Sabrina Baptista Ferreira (PQ)², Vitor Francisco Ferreira (PQ)³, Jose Carlos Netto-Ferreira (PQ)^{1,4}, Dari Cesarín-Sobrinho (PQ)¹.

1-Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, UFRRJ. *e-mail: cosme_br2004@yahoo.com.br;

2-Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFRJ.

3-Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFF.

4-Divisão de Metrologia Química, Lamoc, Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia, Inmetro.

Palavras Chave: naftoquinona, ASH, fluorescência, UV-Vis.

Introdução

As quinonas podem ser definidas quimicamente como compostos oxigenados, formados a partir da oxidação de fenóis. Sua principal característica estrutural é a presença de dois grupos carbonílicos formando um sistema conjugado tais como as benzoquinonas, naftoquinonas e antraquinonas.

Na natureza as quinonas são encontradas em várias famílias de plantas, fungos, bactérias e insetos, e se destacam por apresentarem inúmeras atividades biológicas^{1,2}, sendo talvez a mais importante aquela relacionada com a geração de espécies reativas de oxigênio (ERO).

Muitos derivados sintéticos baseados na estrutura da β -lapachona vêm apresentando resultados promissores em diversos ensaios biológicos. Sendo assim, decidiu-se estudar os aspectos termodinâmicos que estão ligados aos processos de interação de uma série de derivados furânicos da 2-fenil-2,3-diidronafto[1,2-b]furano-4,5-diona Figura 1 com a albumina sérica humana (ASH) e avaliar suas características segundo mudanças estruturais e eletrônicas que estão envolvidas na interação composto bioativo/proteína.

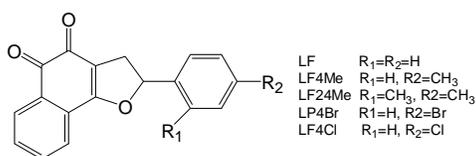


Figura 1. Derivados da 2-fenil-2,3-diidronafto[1,2-b]furano-4,5-diona.

Resultados e Discussão

Para a avaliação dos parâmetros termodinâmicos ΔG° , ΔH° e ΔS° , foram realizados experimentos de supressão de fluorescência³ e de espectroscopia na região do ultravioleta-visível. Os resultados experimentais foram analisados segundo as equações de Stern-Volmer, Stern-Volmer modificado e van't Hoff, os quais possibilitaram ainda a obtenção das constantes de velocidade de supressão (k_q) e de ligação (K_b) e o número de sítios de interação (n) (Tabela 1).

37ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Tabela 1. Valores para os parâmetros termodinâmicos ΔG° , ΔH° e ΔS° e para k_q , K_b e n relativos à interação entre as 1,2-naftoquinonas e ASH, a 37°C (pH = 7,4 C = 1×10^{-5} mol/L).

	ΔH° (kJ/mol)	ΔS° (kJ/mol)	ΔG° (kJ/mol)	k_q (L/mol.s)	K_b (E+5)	n
LF	-15,15	0,035	-26,14	3,9E+12	0,84	1,08
LF4Me	-21,82	0,011	-25,16	4,7E+12	0,13	0,94
LF24Me	-13,46	0,045	-27,39	7,3E+12	0,26	1,13
LF4Br	-17,83	0,021	-24,19	4,1E+12	0,13	1,11
L4Cl	-10,39	0,054	-27,11	5,3E+12	0,11	1,08

Os valores negativos para a energia livre de Gibbs indicam que em todos os casos estudados os processos de interação são espontâneos e a sua grandeza ($\Delta G^\circ \sim -25 \text{ kJ mol}^{-1}$) indicam que o processo é reversível. Os valores de $\Delta H^\circ < 0$ indicam que a interação apresenta caráter hidrofílico, e os valores de $\Delta S^\circ > 0$ sugerem uma participação favorável desse parâmetro no processo de interação. Os valores de $k_q > 10^{12} \text{ L mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ indicam que o mecanismo mais provável para o processo de supressão seja estático. A sobreposição dos espectros de emissão de fluorescência da proteína com o espectro de absorção para os compostos estudados sugerem a participação do processo de transferência ressonante de Förster. Valores elevados de K_b indicam um alto nível de ligação enquanto $n \sim 1$ sugere apenas um sítio de interação.

Conclusões

Os resultados encontrados sugerem que a albumina sérica humana pode ser um bom carreador dos compostos analisados. Independentemente dos grupos substituintes e sua posição na estrutura dos derivados furânicos da 1,2-naftoquinona, os parâmetros estruturais e eletrônicos são todos favoráveis tanto do ponto de vista entrópico quanto entálpico.

Agradecimentos

UFRRJ, UFRJ, CAPES e FAPERJ

1 Silva, M. N.; Ferreira, V. F.; Souza, M. C. B. V.; *Quim. Nova*, **2003**, *26*, 407.

2 Hussain, H.; Krohn, K.; Ahmad, V. U.; Miana, G. A.; Green, I. R.; *Arxivoc* **2007** (ii), 145.

3 Chen, G. Z.; Huang, X. Z.; Xu, J. G.; Zheng, Z. Z.; Wang, Z. B. *The methods of fluorescence analysis*, Science Press, Beijing, 1990.