

# Síntese de um promissor ligante modelo para a esfera de coordenação do sítio ativo das PAPs

Maryene Alves Camargo\* (PG), Ademir Neves (PQ)

Laboratório de Bioinorgânica e Cristalografia, Departamento de Química – Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC 88040-900, Florianópolis – SC, Brasil. \*maryene@gmc.ufsc.br

Palavras Chave: bioinorgânica, ligante não-simétrico, PAPs

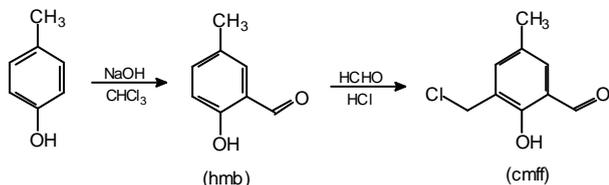
## Introdução

As fosfatases ácidas púrpuras (PAPs) constituem uma classe de metaloenzimas que contêm um cluster binuclear  $Fe^{III}M^{II}$  ( $M = Fe, Mn$  ou  $Zn$ ) em seus sítios ativos e atuam na clivagem de ésteres de fosfato *in vitro* com atividade catalítica ótima em meio ácido, podendo ser encontradas em plantas, animais, fungos e bactérias. Atualmente, vem-se buscando, através do estudo de compostos-modelos, maiores informações sobre a reatividade das PAPs, procurando auxiliar na comprovação de seu mecanismo de ação, bem como na busca de seu papel nos sistemas vivos. Dentro desse contexto, o grupo de pesquisa do LABINC tem desenvolvido com sucesso um método geral de preparação de complexos binucleares, utilizando-se ligantes assimétricos<sup>1</sup>.

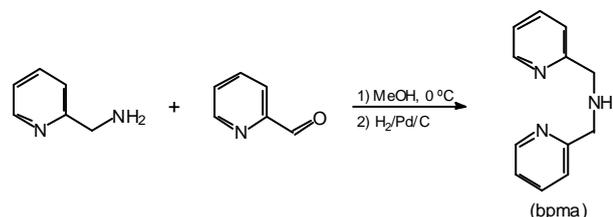
Dessa forma, a busca de ligantes binucleantes com grupos N,O-doadores capazes de induzir um ambiente de coordenação não-simétrico para íons metálicos, com sítios lábeis para a reatividade é uma estratégia conveniente para o estudo e investigação de modelos estruturais e/ou funcionais para as PAPs. No presente trabalho, é apresentada a síntese de um promissor ligante modelo para esfera de coordenação dessas melatoenzimas.

## Resultados e Discussão

Para a síntese do ligante (**L**) seguiu-se a rota:



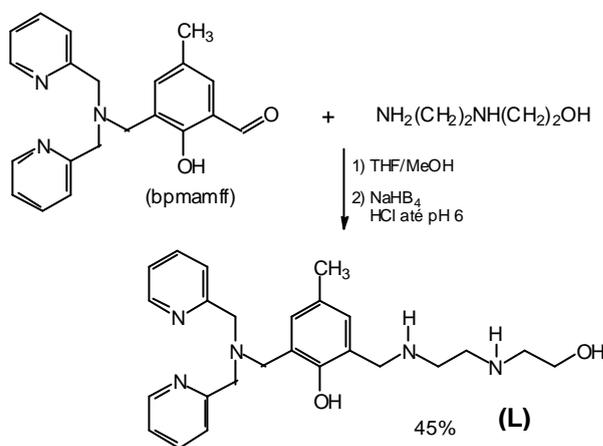
**Figura 1.** Esquema para síntese do precursor cmff. Através da reação de formilação<sup>2</sup> do *p*-cresol, o hmb foi preparado. Em seguida, a partir da reação de clorometilação obteve-se o precursor cmff.



29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

**Figura 2.** Esquema de síntese do precursor bpma. A síntese do precursor bpma (figura 2) foi obtido a partir de uma reação de condensação seguida por redução da correspondente imina formada.

A partir disso, realizou-se a reação de substituição nucleofílica do cloro no cmff pela amina secundária do bpma, formando, assim, o bpmamff, o qual reagiu com 2-(2-aminoetilamino)etanol para a formação da imina correspondente com conseguinte redução da mesma para a obtenção do produto final **L** (óleo alaranjado):



**Figura 3.** Esquema de síntese do produto final **L**.

**RMN <sup>1</sup>H (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>):**  $\delta$  8,55 (d, 2H); 7,63 (t, 2H); 7,37 (d, 2H); 7,16 (q, 2H); 6,89 (s, 1H); 6,84 (s, 1H); 3,85-3,83 (m, 6H); 3,74 (s, 2H); 3,64 (t, 2H); 2,76 (s, 6H); 2,22 (s, 3H), **RMN <sup>13</sup>C (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>):**  $\delta$  20,66; 48,12; 48,71; 49,88; 51,57; 56,27; 59,38; 60,66; 122,39; 122,91; 123,31; 125,54; 127,57; 129,98; 136,95; 149,05; 153,73; 158,61, **IV (filme KBr):** 3221, 3065, 3011, 2832, 1592, 1570, 1477, 1435, 1368, 1233, 1051, 763 cm<sup>-1</sup>.

## Conclusões

A partir da rota sintética adotada foi possível se obter o ligante não-simétrico **L**, o qual apresenta-se bastante promissor como ligante modelo para esfera de coordenação do sítio ativo das PAPs.

## Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq.

<sup>1</sup> Lanznaster, M.; Neves, A.; Bortoluzzi, A. J.; Aires, V. V. E., et al. *J. Biol. Inorg. Chem.* **2005**, *10*, 319.

<sup>2</sup> Thoer, A.; Denis, M.; Delmas, M. e Gaset, A. *Synthetic Commun.*  
**1988**, *18*, 2095.