

## Síntese de um Novo Ligante Binucleante Bioinspirado

Rafael Jovito (PG)<sup>1\*</sup>, Mauricio Lanznaster (PQ)<sup>2</sup> e Ademir Neves (PQ)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratório de Química Bioinorgânica e Cristalografia, Departamento de Química,

Universidade Federal de Santa Catarina, Campus Universitário, Bairro Trindade, 88040-900 Florianópolis, SC

<sup>2</sup> Centro de Estudos Gerais, Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Outeiro de São João Batista s/n, Centro, 24020-150, Niterói, RJ

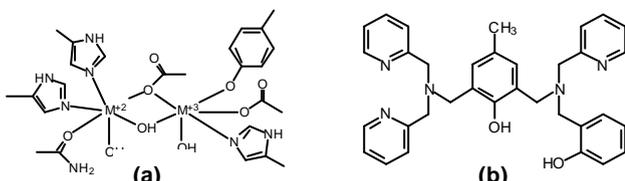
\* rjovito@yahoo.com.br

Palavras Chave: ligantes não-simétricos, ligantes assimétricos, PAP's.

### Introdução

Inúmeras enzimas contêm metais de transição em seu sítio ativo. Porém, a grande variedade de aminoácidos que podem estar presentes nesses sítios catalíticos torna bastante difícil sua caracterização. Uma estratégia para o estudo desses compostos é a síntese de complexos modelos. Uma classe de enzimas alvo desse tipo de estudo é a das Fosfatases Ácidas Púrpuras (PAP's). Alguns dos melhores modelos já obtidos para as PAP's foram obtidos utilizando o ligante H<sub>2</sub>BPBPMP<sup>3</sup> (Figura1a), que possui um ambiente assimétrico adequado para a obtenção de compostos heterovalentes.<sup>1,2</sup> No entanto, o braço destinado à coordenação do cátion trivalente não tem todos os átomos doadores semelhantes aos presentes no sítio ativo das PAP's (Figura1b).

**Figura 1.** Representação do sítio ativo das PAP's (a)

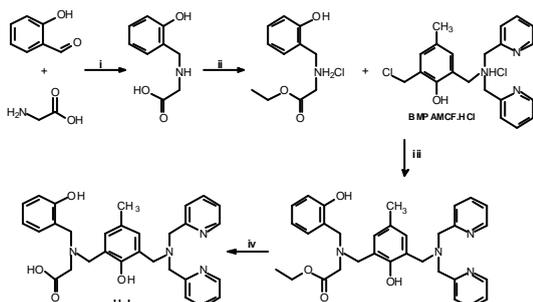


e do ligante H<sub>2</sub>BPBPMP (b).

Neste trabalho, descreve-se a síntese e caracterização de um novo ligante que possui um grupo ácido no lugar do grupo piridínico presente no ligante H<sub>2</sub>BPBPMP.

### Resultados e Discussão

O ligante H<sub>2</sub>L foi sintetizado de acordo com o esquema mostrado na Figura 2.



29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

**Figura 2.** Síntese do ligante H<sub>2</sub>L.

Na etapa **i** tem-se uma condensação em meio básico seguida da redução da imina formada com NaBH<sub>4</sub>. Em **ii** obteve-se o etil-éster do grupo ácido do produto de **i**, visando protegê-lo. Este é então adicionado ao BMPAMCF.HCl<sup>2</sup> em **iii**, e o grupo protetor é retirado por hidrólise básica em **iv**, chegando-se ao ligante final, caracterizado por ponto de fusão, análise elementar e RMN.

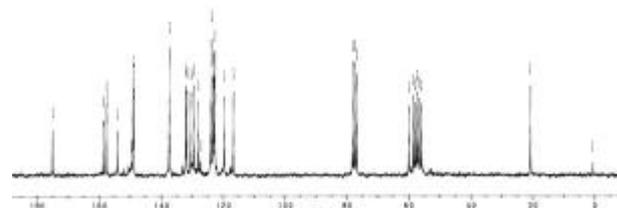
P.F.: 167-168 °C.

% CHN calculados para C<sub>30</sub>H<sub>32</sub>N<sub>4</sub>O<sub>4</sub>·3H<sub>2</sub>O

(566,65 g.mol<sup>-1</sup>): C<sub>63,59</sub> H<sub>6,76</sub> N<sub>9,89</sub> %

CHN obtidos: C<sub>63,01</sub> H<sub>6,49</sub> N<sub>9,71</sub>

<sup>1</sup>H NMR, ppm (CDCl<sub>3</sub>): 2,28 (s, 3 H); 3,29 (s, 2 H); 3,76 (s, 2 H); 3,87 (s, 6 H); 3,90 (s, 2 H); 6,86 (d, 2 H); 6,98-7,04 (2s, 2 H); 7,21 (t, 2 H); 7,36 (t, 2 H); 7,51 (d, 2 H); 7,83 (dt, 2 H); 8,61 (d, 2 H).



**Figura 3.** Espectro de RMN de <sup>13</sup>C do ligante H<sub>2</sub>L em CDCl<sub>3</sub>.

### Conclusões

Um novo ligante assimétrico binucleante NO-doador foi sintetizado e caracterizado, sendo proposto para síntese de complexos heterobimetálicos de grande potencial na modelagem do sítio ativo das PAP's.

### Agradecimentos

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> Kimura, E. *Current Opinion in Chem. Biology.* **2000**, 4, 207.

<sup>2</sup> Karsten, P.; Neves, A.; Bortoluzzi, A.; Drago, V. and Lanznaster, M. *Inorganic Chemistry*, **2002**, v. 41, p. 4624-4625.

*Sociedade Brasileira de Química ( SBQ)*

<sup>3</sup> Neves, A.; Brito, M. A.; Drago, V.; Griesar, K. and Haase, W.  
*Inorganica Chimica Acta* , **1995**, v. 237, p. 131-135.