

Modelos biomiméticos do citocromo P-450 na oxidação da atrazina

Maria Carolina A. de F. Gotardo (PG)*, Marina R. Lelo (IC), André A. Guedes (PG), Marilda das Dores Assis (PQ) gotardo_carol@hotmail.com

Departamento de Química – Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto – Universidade de São Paulo – Av. Bandeirantes 3900 14040-901 Ribeirão Preto-SP - Brasil

Palavras Chave: P450, Metaloporfirina, Atrazina

Introdução

A utilização de metaloporfirinas (MeP) sintéticas como modelos biomiméticos do citocromo P450 (P-450) têm recebido muita atenção nas últimas décadas, principalmente na oxidação de fármacos e poluentes¹. Poucos estudos têm direcionado sua aplicação no entendimento do metabolismo de pesticidas, que nas plantas ocorre principalmente via P-450.

Neste trabalho nós reportamos a atividade catalítica de metaloporfirinas comerciais **MnTDCPP** e **MnTFPP**, na oxidação de um herbicida, a atrazina (ATZ) por iodossilbenzeno (PhIO) e ácido metacloroperbenzóico (m-CPBA). O objetivo é avaliar a capacidade das MeP em mimetizar a ação dos P450, que *in vivo* participa da etapa de N-desalquilação nas posições do C4 e/ou C6 do anel da atrazina.

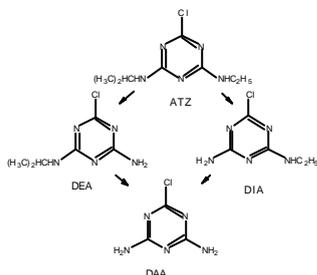


Figura 1:Metabolismo da ATZ pelo P-450

Resultados e Discussão

As reações ocorreram em ACN (1,5 mL) na proporção catalisador: oxidante: substrato 1:60:120. A análise foi realizada por HPLC. A atividade catalítica das MeP também foi avaliada na presença do ligante imidazol (Im), nas reações com m-CPBA. A relação molar catalisador: ligante foi 1:10.

Tabela 1: Rendimento total das reações de oxidação da ATZ catalisada pelas metaloporfirinas.

	PhIO	m-CPBA	m-CPBA+ Im
Mn TFPP	32	11	2
MnTDCPP	3	10	5

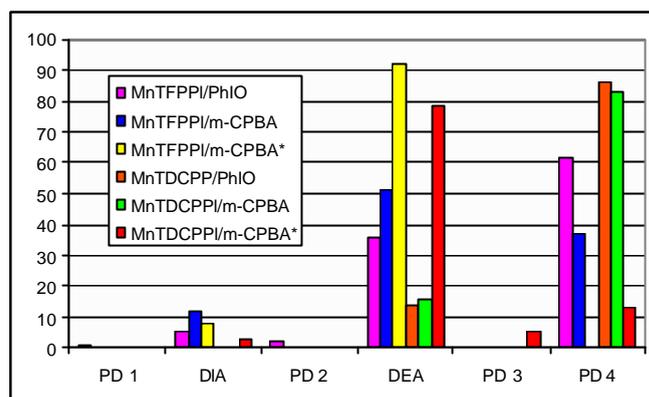


Figura 2: Distribuição dos produtos em porcentagem (* adição de Im).

Observa-se que:

→ as MeP foram capazes de oxidar o herbicida com rendimentos de até 32% (sistema MnTFPP/ PhIO);

→ o metabólito DEA correspondeu a um dos principais produtos de oxidação indicando que esses complexos são capazes de mimetizar a ação do P450 *in vivo*.

→ além do metabólito DEA e DIA, houve a formação de 4 produtos desconhecidos, PD1- PD4, denominados de acordo com a ordem de eluição, sendo o PD4 um dos principais produtos das reações;

→ a presença de Im favoreceu a formação do metabólito DEA, com concomitante diminuição na quantidade de PD4, indicando tratar-se de mecanismos distintos e competitivos.

Conclusões

As manganêsporfirinas foram capazes de catalisar a oxidação da atrazina, mimetizando a ação do P450, podendo atuar como uma importante ferramenta no entendimento do metabolismo deste composto *in vivo*.

Agradecimentos

FAPESP, CAPES e CNPQ

¹ Bernadou, J.; Meunier B. *Adv. Synt. & Catal.* **2004**, *346*, 171.