

Estudo da reatividade de compostos de coordenação de cobre frente à molécula de CO₂: busca por miméticos à Anidrase Carbônica

Rafaela O. Moreira ¹(IC)*, Christiane Fernandes ¹(PQ), Adolfo Horn Jr ¹(PQ), Marcos N. Eberlin ²(PQ)

rafaelaomoreira@gmail.com

¹LCQUI – UENF – Campos/RJ ² Laboratório ThoMSon- IQ-Unicamp- Campinas/SP

Palavras Chave: Molécula de CO₂, compostos de coordenação, fixação, cobre.

Introdução

A reação de hidratação do CO₂, a qual é consideravelmente lenta ($k = 3,72 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$), pode ser acelerada na presença de metaloenzimas. Dentre estas metaloenzimas, a Anidrase Carbônica II humana é a mais representativa, acelerando a reação de hidratação na ordem de 10^7 .¹ O sítio ativo desta enzima possui uma molécula de água coordenada a um átomo de zinco, a qual em condições adequadas de pH gera o íon hidróxido, responsável pela atividade catalítica.² Neste trabalho relata-se o estudo da reatividade de três compostos de coordenação de cobre frente à molécula de CO₂.

Resultados e Discussão

Os compostos (1), (2) e (3) foram sintetizados e caracterizados conforme descrito previamente.³

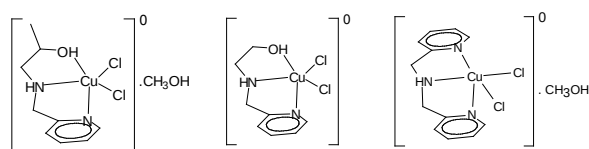


Figura 1. Estrutura dos compostos (1), (2) e (3), respectivamente.

O estudo da reatividade destes compostos frente à molécula de CO₂ foi realizado empregando-se duas metodologias distintas: a) reagindo-se uma solução aquosa e básica do composto com CO₂ atmosférico; b) reagindo-se uma solução aquosa e básica do composto com CO₂ gerado *in situ*. Os compostos obtidos foram caracterizados inicialmente por espectroscopia de IV para confirmar a obtenção de compostos contendo o ânion carbonato em suas estruturas. Posteriormente os compostos foram analisados por espectrometria de massas com ionização por *electrospray* e eletroquímica. O composto (1) resultou em um composto contendo carbonato quando reage com CO₂ atmosférico, em meio aquoso e básico. Entretanto, o composto (1) não reage com CO₂ gerado *in situ*, nas mesmas condições. O composto (2) reage tanto com CO₂ atmosférico quanto com CO₂ gerado *in situ*, em meio aquoso e básico, resultando em compostos

idênticos, contendo o ânion carbonato. O composto (3) não reage com CO₂ atmosférico ou CO₂ gerado *in situ*, em meio aquoso básico. Para os compostos que reagiram com CO₂ foram verificadas bandas adicionais no espectro de infravermelho em 1716 e na região de 1350-1380 cm⁻¹, indicativo da presença do anion carbonato. A técnica de ESI-MS permitiu a identificação da estrutura dos compostos sugerindo a formação de espécies aniônicas contendo um íon sódio como contra-íon (ver Figura 2).

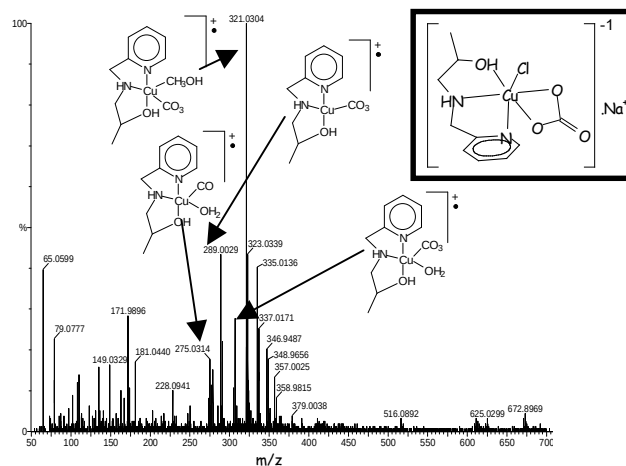


Figura 2. ESI-(+)-MS/MS em solução de água:metanol (1:1) para o produto da reação entre o complexo (1) e o CO₂ atmosférico.

Conclusões

O composto (2) mostrou-se o mais eficiente na fixação da molécula de CO₂ e o composto (3) mostrou-se inativo. Sugere-se que a presença do segundo grupo piridínico na estrutura do ligante esteja associada à baixa reatividade apresentada pelo complexo (3) (efeito estérico espacial).

Agradecimentos

CNPq, UENF.

¹McCall, K. A.; Huang, C. C.; Fierke C. A. J. Nutr. (130) 2000,1437S-1446S

²Lindskog, S.; Henderson, L. E.; Kannan, K. K.; Liljas, A.; Nyman P. O.; Strandberg, B. The Enzymes. Ed. P. Boyer, Academic Press, New York, 3 rd, 1971, vol. 5, 587-665

³ Bull, E. S., Síntese e Caracterização e Avaliação das atividades de nuclease e antimutagen de compostos de coordenação de cobre, Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual do Norte Fluminense, Campos dos Goytacazes, 2008.