

## Síntese e caracterização de um modelo funcional para a enzima GpdQ

Michelle P. S. De Jesus<sup>1</sup> (IC)\*, Marciela Scarpellini<sup>1</sup> (PQ), Beatriz W. Woddyngton<sup>1</sup> (IC), Felipe J. L. De Matos<sup>2</sup> (IC), Raíssa V. Pereira<sup>3</sup> (IC), Annelise Casellato<sup>1</sup> (PQ)

[michelle.ufri@hotmail.com](mailto:michelle.ufri@hotmail.com)

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, <sup>2</sup>Departamento de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, <sup>3</sup>Instituto Federal do Rio de Janeiro.

Palavras Chave: compostos modelo, cobalto, bioinorgânica

### Introdução

As glicerofosfodiesterases (GDPDs; EC 3.1.4.46) são uma família de enzimas que catalisam a hidrólise da ligação 3'-5' fosfodiéster de glicerofosfodiésteres. Sua função primordial é a degradação de compostos organofosforados. A glicerofosfodiesterase obtida a partir da *Enterobacter Aerogenes* (GpdQ) pertence à família das metalohidrolases binucleares capazes de hidrolisar a ligação P-O de uma vasta gama de substratos<sup>1</sup>. Sabe-se que a enzima é ativa na presença de íons Co<sup>II</sup><sup>2</sup>.

Assim, neste trabalho é apresentada a síntese e a caracterização de um novo complexo binuclear de cobalto(II) com o objetivo de entender o ambiente de coordenação de um dos sítios metálicos da GpdQ.

### Resultados e Discussão

O ligante (**L1**) foi obtido a partir da reação entre 4-bromo salicilaldeído com o aminoácido glicina em metanol, utilizando os métodos descritos na literatura<sup>3</sup> com as modificações necessárias. (pf = 212 °C). NMR (DMSO d<sup>6</sup> ppm): 3,22 (s,2H), 3,92 (s,2H), 6,77(m,2H), 7,34(s,1H). IR (cm<sup>-1</sup>): 3423 v (N-H<sub>amina</sub>), 3128-3088v (C-H<sub>ar.</sub>), 3046 δOH (fenol), 1634 v (C=O<sub>ácido</sub>), 1578-1410 v (C=C<sub>ar.</sub>), 1256 v (C-O<sub>ácido</sub>), 1192 v (C-O<sub>fenol</sub>), δ 818 (C-H<sub>ar.</sub>), 547 v (C-Br).

A síntese do complexo **1** foi realizada em metanol entre quantidades estequiométricas do ligante **L1** e do Co(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> · 6H<sub>2</sub>O na presença de Et<sub>3</sub>N. Foi obtido um pó castanho o qual foi recristalizado em metanol fornecendo um material microcristalino (pf= 242 °C).

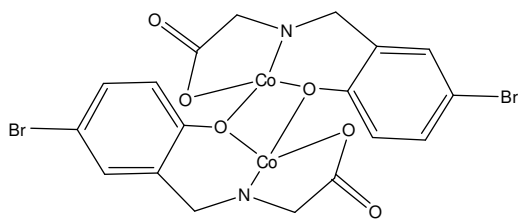


Figura 1. Proposta de estrutura do complexo 1.

O complexo **1** foi caracterizado através de espectroscopia de infravermelho e eletrônica, eletroquímica e condutividade. Através do infravermelho foi possível observar um deslocamento em relação ao ligante. IR: 3384 v (N-H<sub>amina</sub>), 3113-2926 v (C-H<sub>ar.</sub>) 1592 v (C=O<sub>ácido</sub>), 1470-1390 v (C=C<sub>ar.</sub>), 1263 v (C-O<sub>ácido</sub>), 1188 v (C-O<sub>fenol</sub>), δ (831 C-H<sub>ar.</sub>), 545 v (C-Br).

Os espectros eletrônicos do ligante livre e do complexo foram medidos em DMSO na faixa entre 200-900nm. O espectro do complexo apresentou duas bandas: uma sendo atribuída a uma transição intraligante π-π\* e a segunda a uma transição d-d.

A análise do espectro na região do visível forneceu valores de λ<sub>max1</sub> 385nm (ε = 1417 M<sup>-1</sup>cm<sup>-1</sup>) atribuídas a uma banda de transição intraligante e uma segunda banda em λ<sub>max2</sub> 668nm (ε = 565 M<sup>-1</sup>cm<sup>-1</sup>) que é consistente com uma transição d-d.

O voltamograma cíclico do complexo **1** revelou apenas uma onda irreversível em 0,534V vs Fc<sup>+</sup>/Fc atribuída ao processo Co<sup>II</sup> → Co<sup>III</sup> + e<sup>-</sup>.

O baixo valor de condutividade elétrica obtido em DMSO concorda com a proposta de um complexo binuclear neutro.

### Conclusões

Foi obtido um novo complexo binuclear de cobalto II. A partir destas caracterizações, poderão ser planejados experimentos para estudar a atividade catalítica na presença de diversos substratos.

### Agradecimentos

Os autores agradecem aos seguintes órgãos pelas bolsas e auxílios concedidos: PIBIC/UFRJ, Faperj, CNPq e L'Oréal.

<sup>1</sup> Zheng, B., Berrie, C. P., Corda, D. & Farquhar, M. G. Proc. Natl Acad. Sci. USA, , 100, 1745, 2003.

<sup>2</sup> Cox RS, Schenk G, Mitic N, Gahan L, Hengge AC, J. Amer. Chem. Soc., 129, 9550. 2007

<sup>3</sup> Lanznaster, M., Tese de Doutorado, UFSC, 2003.