

Estudo da Influência da Conformação do Grupo Espaçador na Estabilidade de Complexos Multinucleares de Platina(II)

Lucas Fagundes Esteves¹(PG)*, Hélio Ferreira dos Santos¹(PQ), Luiz Antônio Sodré Costa¹(PQ)

¹Departamento de Química – Universidade Federal de Juiz de Fora, Núcleo de Estudos em Química Computacional (NEQC). * lu_fa_es@hotmail.com

Palavras Chave: Complexos Multinucleares, Platina(II), Conformações, Mecanismo de Ação.

Introdução

Os complexos multinucleares de platina(II) ganharam destaque nos últimos anos, devido aos seus diferentes modos de coordenação ao DNA inacessíveis aos complexos mononucleares.¹ Os adutos formados podem levar a diferentes lesões nesta biomolécula, fazendo com que o espectro de atividade dos complexos multinucleares seja bastante distinto dos análogos mononucleares.^{2,3}

Neste trabalho, é avaliada a estabilidade de complexos binucleares de platina(II), separados por uma cadeia de 1,6-hexanodiamina, através de um parâmetro capaz de descrever o grau de distorção deste grupo espaçador.

Resultados e Discussão

A otimização da geometria desses complexos foi realizada no nível DFT com o funcional B3LYP, com o pseudo potencial LANL2DZ para os átomos de platina e o conjunto de funções de base 6-31+G(d,p) para os demais átomos. A energia em fase aquosa foi obtida utilizando o modelo PCM/UAHF e PCM/Bondi. A fórmula estrutural do complexo é mostrada na Figura 1:

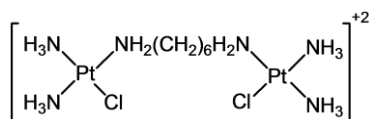


Figura 1. Complexo binuclear designado pela notação 1,1/c,c.

Foi realizada uma simulação de Monte Carlo para a molécula de 1,6-hexanodiamina, sendo, então, obtidos 100 arranjos conformacionais no nível semi-empírico PM3, dos quais apenas 5 foram escolhidos.

O parâmetro que foi proposto para descrever o grau de distorção destas moléculas é mostrado na equação a seguir:

$$\lambda = \langle |\omega| \rangle \times d_{N-N} / 1000^\circ \text{Å}$$

Este parâmetro é adimensional e contém a média do módulo dos ângulos diedros entre carbonos e a distância entre os nitrogênios da cadeia espaçadora. Através dele é possível fazer 34ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

uma estimativa da estabilidade dos compostos multinucleares como mostrado na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros conformacionais do grupo espaçador.

Número de $ \omega < 180^\circ$	$\langle \omega \rangle / ^\circ$	$d_{N-N} / \text{Å}$	λ
0	178,5122	8,91973	1,592281
1	153,9372	7,95429	1,224461
2	126,8278	8,24265	1,045397
3	109,3039	6,70742	0,733147
4	89,4634	5,82849	0,521437

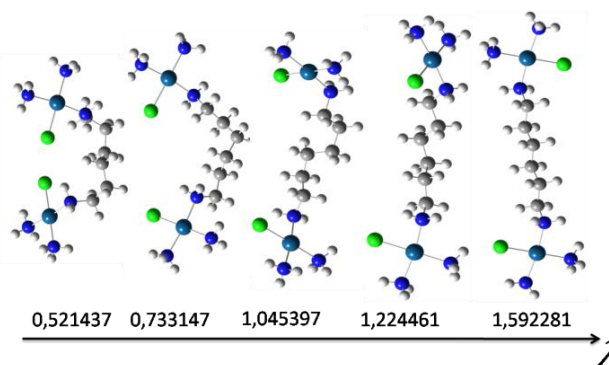


Figura 2. Estruturas otimizadas dos complexos.

Conclusões

Existe uma boa correlação entre o valor de λ e a energia total desses complexos, tanto em fase gás, quanto em fase aquosa. À medida que o valor de λ aumenta, a energia total diminui linearmente.

A partir do presente trabalho será possível, portanto, realizar o estudo da influência da conformação da cadeia espaçadora, na barreira de hidrólise de compostos binucleares, haja vista que essa etapa reacional é determinante na ativação desses complexos para que ocorra a coordenação à molécula do DNA. Esses cálculos estão em fase de conclusão e serão apresentados oportunamente.

Agradecimentos

FAPEMIG

¹ Costa, L.A.S.; Hambley, T.W.; Rocha, W.R.; De Almeida, W.B. e Dos Santos, H.F.; *Int. J. Quant. Chem.* **2006**, *106*, 2129.

² Farrel,N.; *Advances in DNA Sequence Specific Agents.* **1996**, *2*, 187.

³ Farrel,N.; *Comments on Inorganic Chemistry.* **1995**, *16*, 373.