

Efeito da Concentração do 2-(2'-hidroxifenil benzoxazol) em sua Reatividade Frente ao Radical Livre ABTS^{•-}

Neivan R. N. Silveira¹ (IC)*, Daniel Rettori¹ (PQ), Carolina Vautier-Giongo¹ (PQ). neivanr11@gmail.com

¹ Laboratório de Química e Bioquímica de Espécies Altamente Reativas (LQBEAR) – Universidade Federal de São Paulo, Campus Diadema

Palavras Chave: 2-(2'-hidroxifenil benzoxazol), reatividade, radicais ABTS^{•-}

Introdução

O cérebro de pacientes com a doença de Alzheimer (DA) apresenta indícios de estresse oxidativo, como a ocorrência de produtos de oxidação do DNA e deficiência de antioxidantes endógenos.¹ Em trabalho anterior, visando avaliar a potencialidade do 2-(2'-hidroxifenil benzoxazol) (HPB) na terapêutica da DA, foram realizados estudos de complexação do HPB com íons Cu(II), que atuam na formação das placas β-amiloide, e ensaios exploratórios sobre a reatividade do HPB frente ao radical livre estável ABTS^{•-}.² Neste trabalho, são apresentados (i) um estudo detalhado do efeito da concentração do HPB em sua reatividade frente ao ABTS^{•-} e (ii) uma proposta de mecanismo para esta reação.

Resultados e Discussão

A Figura 1 mostra o efeito da concentração de HPB na concentração de radicais ABTS^{•-} reduzidos pelo mesmo. A inclinação da reta que descreve os pontos experimentais de 0 a cerca de 9 μM de HPB (inclinação = $\alpha \approx 2$) indica que um mol HPB é capaz de reduzir dois mols de radicais ABTS. Esta estequiometria requer dois sítios redutores no HPB, que poderiam ser o hidrogênio fenólico e um dos pares de elétrons não ligantes do oxigênio oxazólico. A diminuição discreta na taxa de redução de radicais ABTS^{•-} pelo HPB, a partir de concentrações de cerca de 9 μM (inclinação = $\alpha \approx 1,5$), indica uma alteração da estequiometria da reação.

Moléculas de HPB são fluorescentes e, em meio aquoso, apresentam uma emissão com máximo em 440 nm. O aumento da concentração de HPB faz surgir uma nova banda de emissão com máximo em 480 nm, que pode ser atribuída à formação de dímeros de HPB (Figura 2). Um gráfico de intensidade de fluorescência em 440 nm em função da concentração de HPB (Figura 3) apresenta uma descontinuidade numa concentração de HPB de cerca de 9 μM, a qual coincide com a concentração de HPB a partir da qual se observa a diminuição da reatividade do HPB frente aos radicais ABTS^{•-}. Este resultado sugere que a provável agregação do HPB impede a reação de um dos sítios redutores da molécula. Tendo como base estes resultados, é sugerido o mecanismo apresentado no Esquema 1 para justificar a estequiometria 1:2 para reação entre o HPB e os radicais ABTS^{•-} a baixas concentrações de HPB.

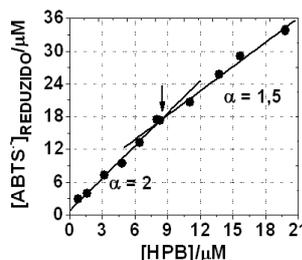


Figura 1. Concentração de radicais ABTS^{•-} reduzidos em função da concentração de HPB.

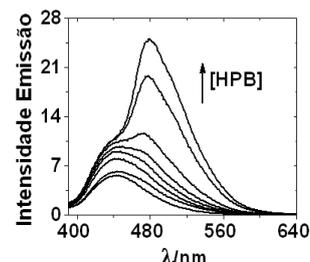


Figura 2. Espectros de emissão de soluções aquosas de HPB.

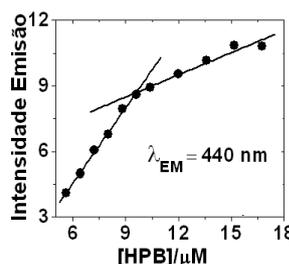
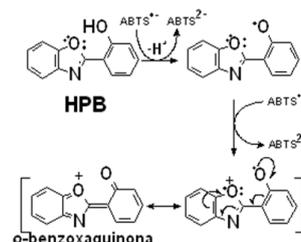


Figura 3. Intensidade de emissão em 440 nm em função da concentração de HPB



Esquema 1. Proposta de mecanismo para a reação de redução de radicais ABTS^{•-} pelo HPB

Conclusões

A estequiometria de reação do HPB com radicais ABTS^{•-} é de 1:2 em baixas concentrações de HPB, sendo os sítios redutores do HPB o hidrogênio fenólico e um dos pares de elétrons não ligantes do oxigênio oxazólico. A formação de dímeros de HPB leva à desativação de um dos sítios redutores da molécula, diminuindo a eficiência da reação de redução dos radicais ABTS^{•-} pelo HPB.

Agradecimentos

Ao CNPq.

¹ Smith, D. G.; Cappai, R.; Barnham, K. J; *Biochim. Biophys. Acta* **2007**, 1768, 1976.

²Rosas, V. H.; Siqueira, B. M.; Almeida, F. C.; Silveira, N. R. N.; Rettori, D. e Vautier-Giongo, C. *Resumos da 34^a SBQ*, **2011**, FIS 131.