

## UM COMPLEXO BIOINSPIRADO DE ZINCO E TIAZOLINA: SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO<sup>1</sup>

Fernanda Silveira dos Santos<sup>2</sup>, Fernando Roberto Xavier<sup>3</sup>, Lucas Göbel<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Vinculado ao projeto “Atividade biocida e antitumoral de compostos de coordenação contendo grupamentos indólicos”

<sup>2</sup> Acadêmico (a) do Curso de Licenciatura em Química – CCT – Bolsista PROBIC/UDESC

<sup>3</sup> Orientador, Departamento de Química – CCT – fernando.xavier@udesc.br

<sup>4</sup> Mestrando em Química Aplicada no PPGQ – CCT

Por conta de sua alta taxa de mortalidade, o câncer destaca-se como uma das maiores preocupações globais, a partir de sua complexidade, e dificuldade no tratamento e cura da doença. Diante dos mecanismos patológicos do câncer, com a proliferação descontrolada e invasiva de células dentro dos sistemas vivos, o campo da química bioinorgânica utiliza, como uma de suas finalidades, a síntese de complexos metálicos para estudar e caracterizar suas atividades antitumorais. As moléculas e metais estudados são capazes de interagir com o DNA de células cancerígenas, impedindo sua replicação, com capacidade para reduzir ou parar a sua multiplicação.

O zinco possui aspectos interessantes na síntese de compostos de coordenação, dentre os quais a estabilização de grupos de saída, disposição a rápidas trocas de ligante e bom potencial de geração de nucleófilos. Por característica própria do Zn(II), não possuir química redox o faz ser muito utilizado por enzimas e proteínas, sem que haja liberação de radicais livres no meio biológico. É ainda, o único metal que faz parte das seis classes fundamentais de enzimas: oxidoredutases, transferases, hidrolases, liases, isomerases e ligases (reconhecidas pela IUBMB - União Internacional de Bioquímica e Biologia Molecular).

A tiazolina é uma molécula heterocíclica com grupos tio-éter e amina nas posições 1 e 3, com conformação monoinsaturada. Alguns estudos indicam que compostos derivados de tiazolina (tanto em sua molécula orgânica ou sua forma complexada) possuem efeitos tóxicos para algumas linhagens de células cancerígenas, denotando potencial farmacêutico para essa classe de moléculas. É importante que o comportamento citotóxico seletivo da tiazolina em tumores também seja levado em consideração, além da sua atividade na inibição da migração de células tumorais.

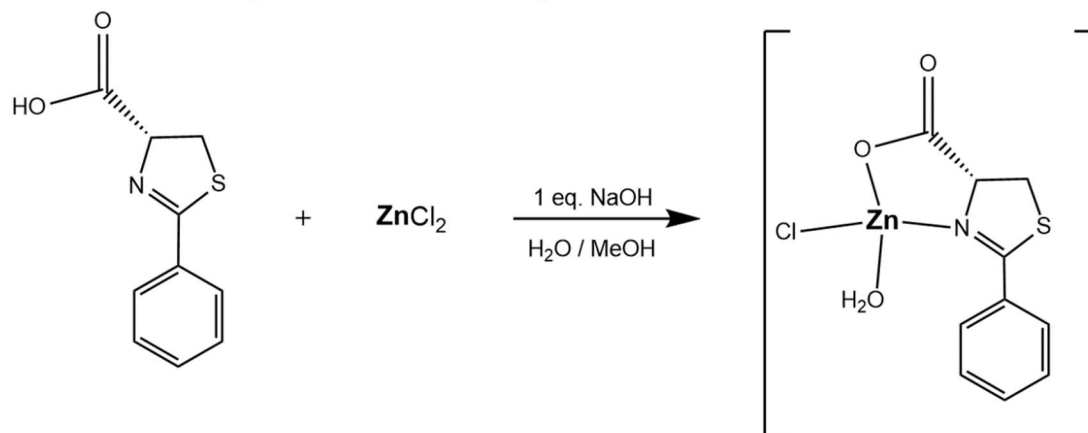
Por essa linha de estudo, compostos derivados de tiazoligantes possuem certo destaque para o desenvolvimento de metalofármacos, por conseguinte, é esperado que a junção entre as características do Zn(II) e da tiazolina possam contribuir para novas evidências diante da procura de terapias antitumorais.

No presente estudo foi preparado um complexo de Zn(II) com um tiazoligante, a tiazolina. A síntese deste foi realizada conforme descrito no trabalho de Maltsev (2013) sendo levada a análise de TLC (cromatografia em camada fina com hexano-acetato de etila (1:1) + “a”2% ácido etanóico) e posteriormente a análises espectroscópicas. Para a caracterização do ligante tiazolina foi optado pela espectroscopia de RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C, além de FT-IR.

A síntese do complexo foi realizada, conforme a Figura 1, em estequiometria (1:1) para metal/ligante com rendimento próximo a 23% e posteriormente houve formação de cristais. Ainda, foram realizadas caracterizações do complexo de Zn(II) via espectroscopia na região do infravermelho e Raman, UV-Vis no estado sólido (Refletância difusa) e TEM/EDS. As caracterizações citadas foram de extrema importância para que a síntese realizada pudesse

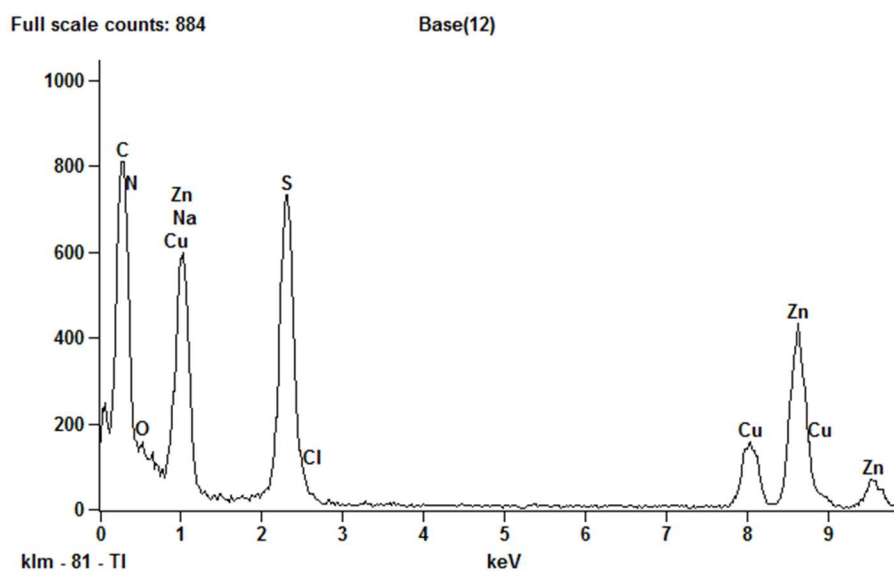
prosseguir o estudo a novas análises que irão avaliar a interação do complexo com o DNA (com DNA de espermatozóide de salmão), com estudos *in silico* via ancoragem molecular.

**Figura 1.** Síntese do complexo 4 -  $[Zn(L)(OH_2)Cl_2]$



Na Figura 2 é apresentada a análise elementar de um cristal obtido a partir da síntese do complexo de Zn(II), por meio de Espectroscopia de raios X por energia dispersiva – TEM/EDS. A posição dos picos no espectro identifica o elemento, enquanto a intensidade do sinal corresponde à concentração do elemento.

**Figura 2.** TEM/EDS de cristal do complexo 4 -  $[Zn(L)(OH_2)Cl_2]$



**Palavras-chave:** Câncer. Complexos Metálicos. Ligantes bioinspirados.