

Química

## **ESTRUTURA E REATIVIDADE DE COMPOSTOS ORGANOFOSFORADOS TETRACOORDENADOS: UM ESTUDO TEÓRICO**

Maria Fernanda Guimaraes Albuquerque - 7º módulo de Química Bacharelado, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq

Mariana Cristina da Silva - 9º módulo de Química Bacharelado, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq

Gustavo Andolpho - Doutorando em Agroquímica, UFLA

Teodorico de Castro Ramalho - Orientador DQI, UFLA - Orientador(a)

### **Resumo**

Os organofosforados (OF) são substâncias de origem simples, mas com ampla aplicação, incluindo uso como pesticidas, herbicidas e até agentes de guerra. Seu uso pode levar a intoxicação de quem tem contato com ela, uma vez que afetam o funcionamento da enzima Acetilcolinesterase. Nos estudos de como reverter esta intoxicação foi percebido que a enzima fosfotriesterase (PTE) era uma das mais promissoras para este processo. Assim, a proposta deste projeto é a explorar o mecanismo das reações de substituição nucleofílica bimolecular (SN<sub>2</sub>) entre OF e PTE sob diferentes condições de ambiente químico. Para isso, o metóxido, como espécie nucleofílica foi empregada nas reações fora do ambiente enzimático visando mimetizar a enzima fosfotriesterase. Os reagentes consistiram em sete moléculas organofosforadas, com um centro fosfórico e diferentes combinações de grupos substituintes, contanto com os grupos metil, etil, O-metil, O-etil e O-isopropil, além dos halogênios cloro, bromo e flúor. As moléculas foram modeladas utilizando o software GaussView06, a otimização da geometria foi realizada através da Teoria do Funcional de Densidade com o funcional B3LYP e o conjunto de bases def2-TZVP, utilizando o pacote ORCA 5.0. Os resultados da otimização de geometria dos produtos e reagentes foram obtidos no vácuo e em solução, as estruturas foram confirmadas como sendo de mínima energia por cálculos de frequência. A simulação da reação em diferentes ambientes químicos foi realizada utilizando a mesma metodologia descrita anteriormente com os efeitos de solvente sendo incluídos utilizando o método CPCM, com água como solvente. Para o ambiente enzimático, foi realizado um estudo de ancoragem molecular entre os diferentes OF e a enzima PTE utilizando o software Molegro. A partir desses resultados, foi possível obter a energia de ativação (EA) nesses três ambientes químicos, onde foi percebido que três das sete reações estudadas ocorreram mais facilmente no ambiente enzimático, em duas não houveram mudanças significativas, sendo a EA muito semelhante para a reação em solução e na enzima. Já para o composto com o substituinte mais simples e flúor e o composto com o substituinte mais complexo e cloro, a reação provou-se mais fácil de ocorrer em solução. Apesar de contraintuitivos esses resultados são importantes para a continuidade do trabalho, onde as interações que regem a reação serão estudadas, podendo ajudar a explicar esse comportamento.

Palavras-Chave: PTE, DFT, Ancoragem Molecular.

Instituição de Fomento: CNPq

Link do pitch: <https://youtu.be/tHkDf4qdnw>