

1 Introdução

O Al(III) está envolvido em diversos danos à saúde humana, entre eles: osteomalácia, anemia hipocrômica microcítica e doenças neurodegenerativas, como Alzheimer e escleroses.

Um dos principais questionamentos em torno do alumínio nas doenças neurodegenerativas é se este seria a causa ou a consequência das patologias.

No cérebro de um paciente com doença de Alzheimer (DA), o íon alumínio possui uma concentração de 3 a 5 vezes maior do que no cérebro de uma pessoa sem desvios cognitivos com a mesma idade [1.1, 1.2].

Embora a doença já tenha sido largamente estudada clínica e sintomatologicamente, estudos citológicos e químicos ainda estão em ascensão.

Na literatura há dados escassos sobre os complexos binários de Al(III) e os aminoácidos [1.3 - 1.13] e, também, sobre os complexos binários de Al(III) e os ligantes fosfatados [1.12 - 1.19], o que pode ser comprovado a partir da base de dados de constantes de estabilidade SQUERY e nos artigos publicados sobre o tema.

Ainda existe a dificuldade de vários artigos sobre o assunto serem extremamente antigos e, por isso, muitas vezes usando apenas a potenciometria como técnica de análise ou de haver apenas uma comunicação sucinta (*letter*), sem a publicação posterior do artigo na íntegra. Sendo assim, as informações encontram-se esparsas e pouco aprofundadas, sendo este um ramo de estudo com muitos focos de conhecimento que precisam de esclarecimentos com maior embasamento experimental e teórico.

Neste trabalho, foram estudados complexos de Al(III). Os ligantes escolhidos foram os aminoácidos – metionina (Met), cisteína (Cis), homocisteína (Hcis) e penicilamina (Pen). Além disso, foi feito um estudo da modelagem molecular e do espectro vibracional dos complexos de Al(III) com os compostos fosfatados adenosina 5'-trifosfato (ATP) e fosfocreatina (PCr).

Os ligantes escolhidos foram aminoácidos sulfurados que apresentam, segundo diferentes estudos, alguma conexão com o Alzheimer e compostos fosfatados que, além de participarem de importantes reações energéticas no corpo humano, são afetados por esta patologia [1.20 - 1.26].

Uma das razões do pouco conhecimento acerca da química de coordenação do íon alumínio(III) é a enorme dificuldade de se trabalhar em solução e, ainda mais, no estado sólido, devido à hidrólise acentuada, que se inicia em pH bastante baixo. Isto gera discrepâncias nos resultados de constantes de estabilidade determinados. Assim, a exatidão e a precisão nas análises com este íon ficam prejudicadas.

Entretanto, o estudo em solução é bastante importante uma vez que o meio biológico é principalmente um meio aquoso.

1.1 Objetivos

Estudar os compostos binários de Al(III) com os aminoácidos metionina, cisteína, homocisteína e penicilamina e com os ligantes fosfatados fosfocreatina e adenosina trifosfato.

Com este intuito será mister:

- a) Realizar titulações potenciométricas dos ligantes sulfurados e das soluções contendo metal-ligante sulfurado.
- b) Determinar as constantes de formação dos complexos binários do Al(III) com os aminoácidos sulfurados.
- c) Construir gráficos de distribuição de espécies dos sistemas binários do Al(III) com os aminoácidos sulfurados em função do pH.
- d) Estudar estruturalmente e espectroscopicamente através de cálculos teóricos e espectroscopia Raman os compostos binários: AlMet, AlCis, AlHcis, AlPen, AlPCr e AlATP, realizando a atribuição vibracional completa dos complexos.
- e) Otimizar computacionalmente as estruturas moleculares propostas para os ligantes e para os complexos binários e, assim, estabelecer os principais comprimentos e ângulos de ligações, averiguando a geometria do esqueleto estrutural e a coordenação do íon metálico.
- f) Examinar espectroscopicamente por meio de RMN de ^{13}C e de ^{27}Al os compostos binários: AlMet, AlCis, AlHcis e AlPen.
- g) Avaliar a capacidade coordenativa dos átomos dos ligantes nos complexos formados com o íon Al(III) usando-se constantes de estabilidade conseguidas através da presente dissertação e de outros estudos do grupo.
- h) Analisar espectroscopicamente por meio de RMN de ^{13}C os compostos binários AlIDA e AlMIDA, visando complementar trabalhos do grupo.