

87. **Dissertação:** "Síntese, Caracterização, Estudos de Complexação e Avaliação da Atividade Citotóxica de Novos Bis-fosfonatos Simétricos".

**Autor (a):** Janaína Marques Rodrigues

**Orientador (a):** Prof. João Batista Neves da Costa

**Data da Defesa:** 19/04/2000

**Resumo:** Os compostos organofosforados são conhecidos agentes quelantes, em especial têm-se os compostos com estrutura N,N-dialquilcarbamilmetilenofosfonato de dialquila, os quais funcionam como poderosos agentes extratores, através dos grupos fosforil e carbonil, para íons de metais alcalinos, alcalinos terrosos e metais de transição. Acredita-se que uma modificação nesta estrutura de forma a aumentar os sítios de coordenação da molécula, possa acarretar em agentes quelantes mais poderosos. Com base nisto, foram preparados sete bisfosfonatos inéditos, os quais foram caracterizados pelas espectrometrias de infravermelho, RMN-<sup>1</sup>H, RMN-<sup>13</sup>C, RMN-<sup>31</sup>P e massas. O estudo preliminar do potencial quelante destes compostos foi realizado em solução, através da titulação espectrométrica de ultravioleta e da titulação condutométrica. A análise por espectrometria de ultravioleta não forneceu dados conclusivos, uma vez que houve superposição das bandas de absorção, além das mesmas ocorrerem próximo a 200 nm, onde há forte interferência de ar no instrumento. Já a análise condutométrica possibilitou que se chegasse a tendências de complexação, sendo verificada a possível formação de complexos com relação estequiométrica igual a 1,0 com os cátions Ni<sup>++</sup>, Zn<sup>++</sup>, Cu<sup>++</sup>, Co<sup>++</sup> e Mn<sup>++</sup>. Considerando que os compostos organofosforados são também conhecidos por sua vasta aplicação como pesticidas, foram realizados testes, com os bisfosfonatos sintetizados, a fim de se avaliar a atividade tóxica destes compostos frente a larvas de *Artemia salina* Leach. Dentre as substâncias estudadas somente a N,N'-bis (fosfonoacetil de dibutila)etilenodiamina apresentou a DL<sub>50</sub> dentro da faixa de concentração estudada, correspondendo ao valor de 5,25x10<sup>-4</sup> M, as demais apresentaram a DL<sub>50</sub> acima da concentração aproximada de 8,0x10<sup>-4</sup>M.