

Síntese e estrutura cristalina de complexo de Zn(II) com a base de Schiff monodentada (4-metoxifenil)[(1E, 2E)-3-fenilprop-2-en-1-ilideno

Giuliano M. Cordeiro¹ (IC), Laís S. P. Dias^{1*} (IC), Renata S. Silva¹ (PG), Andressa Esteves-Souza¹ (PQ), Guilherme P. Guedes¹ (PQ), Marcelo H. Herbst¹ (PQ). laispaschoaletto@hotmail.com

¹Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Departamento de Química, Seropédica, RJ.

Palavras Chave: bases de Schiff, Zn(II), compostos de coordenação.

Introdução

Bases de Schiff são importantes intermediários em várias reações enzimáticas que envolvem a interação entre uma enzima e um grupo carbonílico do substrato. Um dos mais ativos mecanismos catalíticos nos processos biológicos envolve a condensação de uma amina primária numa enzima, geralmente resíduo lisina, com o grupo carbonila do substrato, produzindo uma imina, ou seja, uma base de Schiff. Segundo a literatura¹, as bases de Schiff têm apresentado significativa atividade biológica, dentre elas antifúngica², antimicrobiana³, citotóxica e antitumoral^{4,5}. Ao contrário das bases de Schiff derivadas do aldeído salicílico, que são ligantes bidentados, as reações de complexação de bases de Schiff derivadas do aldeído cinâmico não são conhecidas em detalhe⁶. Neste trabalho nosso objetivo foi investigar a reatividade de uma base de Schiff monodentada na complexação com Zn(II).

Resultados e Discussão

O complexo foi obtido pela adição lenta de solução etanólica de cloreto de zinco anidro à solução da base de Schiff (4-metoxifenil)[(1E, 2E)-3-fenilprop-2-en-1-ilideno, (BS-4-OCH₃) também em etanol, seguida de agitação a 50°C por 2 horas. Monocristais de cor marrom foram obtidos a partir da evaporação lenta do solvente. Os dados de difração de raios-X por monocristal foram coletados à temperatura ambiente no difratômetro Enraf-Nonius Kappa CCD. O complexo ZnCl₂(BS-4-OCH₃)₂ cristaliza no sistema monoclinico e no grupo de espaço P2₁/c. A unidade assimétrica é mostrada na Figura 1 e contém um íon Zn^{II} coordenado a dois ligantes BS-4-OCH₃ e a dois ligantes cloro, em uma geometria tetraédrica distorcida. Os comprimentos de ligação Zn1-N1 e Zn1-N2 são 2.1098(8) Å e 2.0757(3) Å, ao passo que as distâncias de ligação Zn1-Cl1 e Zn1-Cl2 são 2.2348(3) Å e 2.2386(5) Å. Devido à coordenação ao íon metálico, os ângulos diedros entre os grupos 4-metoxifenil e imina nos dois ligantes afastam-se da planaridade, com ângulos de 22.6° (C1-N1-C10-C11) e 44.8° (C17-N2-C26-C31). O empacotamento cristalino é estabilizado por uma rede de interações intermoleculares fracas do tipo C_{sp2}H---O, C_{sp2}H---

C_{sp2} e C_{sp2}-H---Cl envolvendo os ligantes imina e cloro.

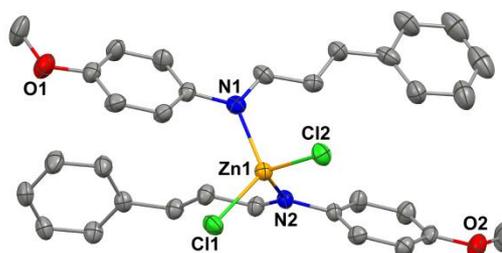


Figura 1. Unidade assimétrica do composto ZnCl₂(BS-4-OCH₃)₂. Elipsóides a 30% de probabilidade. Átomos de hidrogênio foram omitidos por clareza. Cinza (carbono), vermelho (oxigênio), azul (nitrogênio), verde (cloro) e amarelo (zinco).

Conclusões

Foi obtido um novo composto de coordenação de Zn(II) com a base de Schiff monodentada (4-metoxifenil)[(1E, 2E)-3-fenilprop-2-en-1-ilideno, e sua estrutura cristalina e molecular foi determinada por difração de raios-X de monocristal.

Agradecimentos

UFRRJ/PIBIC, LDRX-UFF e FAPERJ

¹Kumar, S., *et al.*, *J. Sci. Ind. Res.*, **2009**, 68, 181.

²Echevarria, A., *et al.*, *J. Braz. Chem. Soc.* **1999**, 10, 60.

³Perry, B. F. *et al.*, *Microbios* **1986**, 45, 181.

⁴Dimmock, J. R.; *Curr. Med. Chem.* **1997**, 4, 22.

⁵Dimmock, J. R.; *et al.*, *J. Pharm. Sci.* **1992**, 81, 1147.

⁶Amirnasr, M., *et al.*, *J. Coord. Chem.*, **2003**, 56, 231.