Novos Complexos de Dioxovanádio(V) com Ligantes Bioativos

Pedro Ivo da S. Maia (PG)^{1*}, Victor M. Deflon (PQ)¹, Sebastião S. Lemos (PQ)¹, Valéria S. Ferreira (IC)¹, Claudia C. Gatto (PG)², Ernesto S. Lang (PQ)², Alzir A Batista (PQ)³, Javier Ellena (PQ)⁴, Eduardo E. Castellano (PQ)⁴. *pedovivo@yahoo.com.br

Palavras Chave: complexos de Vanádio, semicarbazona, tiossemicarbazona

Introdução

As propriedades anti-diabéticas de compostos de vanádio, demonstradas *in vitro*, *in vivo* e em estudos clínicos, têm atraído interesse como potencial agente terapêutico, principalmente devido à possibilidade de administração oral e dos efeitos benéficos tanto no diabetes tipo 1 quanto no tipo 2¹.

Tiossemicarbazonas e semicarbazonas são conhecidas por suas potenciais atividades biológicas como, antitumoral, antibacterial, antiviral e antimalarial².

Este trabalho relata a síntese e caracterização estrutural de dois novos complexos de vanádio(V) com os ligantes 2-acetilpiridina-N4-fenilsemicarbazona (Hapfsc) e o 2-acetilpiridina-N4-metiltiossemicarbazona (Hapmtsc): [VO₂(apfsc)] e [VO₂(apmtsc)], respectivamente.

Resultados e Discussão

O complexo [VO₂(apfsc)] (1) é obtido como um sólido amarelo através de reação estequiométrica quantitativa do [VO(acac)₂] com o ligante Hapfsc em MeOH. Micro-análises CHN (enc./calc): C 48,18 / 50,01; H 3,47 / 3,90; N 16,06 / 16,66 %.

Figura 1. Estrutura proposta do complexo (1).

O espectro de IV de (1) indica a ausência das bandas características acetilacetonato coordenado. A banda ?(V=O) típica, observada em 998 cm⁻¹ no [VO(acac)₂], ocorre em 934 cm⁻¹ para complexo.

O espectro de ¹H-RMN apresenta integrações e multiplicidades em acordo com a estrutura apresentada na **figura 1**. O espectro de ⁵¹V-RMN mostra somente um pico em -487.4 ppm, consistente com o complexo mononuclear.

A síntese do complexo $[VO_2(apmtsc)]$ (2) é semelhante à síntese de (1), havendo mudança do solvente para CH_3CN e do ligante para o Hapmtsc.

Micro-análises CHNS (enc./calc.): C 36,90 / 37,25; H 3,72 / 3,82; N 18,86 / 19,31; S 10,93 / 11,05 %.

No espectro de IV de (2) a banda ?(V=O) aparece em 921 cm⁻¹. No espectro de ¹H-RMN um dos sinais para metila, em d = 2,916 ppm, aparece como um dupleto devido ao acoplamento com o hidrogênio do N(4) (**figura 2**). O espectro de ⁵¹V-RMN também mostra apenas um sinal em -404.2 ppm.

Cristais marrons obtidos de uma solução foram analisados por difração de raios X. O sistema cristalino é o ortorrômbico e grupo espacial Pbca; a = 1228,90(4) pm; b = 1253,80 (4) pm; c = 1552,00(4) pm; a = b = g = 90 °; Z = 8; S = 1,153; R_1 = 0,0489; wR_2 = 0,1188 [I>2s(I)].

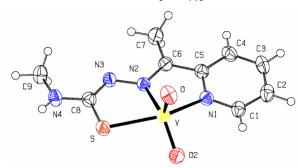


Figura 2. Figura ORTEP (50%) do complexo (2).

Conclusões

Novos complexos de vanádio(V) foram sintetizados e caracterizados com uma semi e uma tiossemicarbona como uma contribuição para a química de coordenação do vanádio com estes ligantes de interesse farmacológico. Tais complexos se apresentam como potenciais agentes para o mimetismo da insulina bem como para outras atividades biológicas.

Agradecimentos

CAPES, FAPESP e FINEP (CT Infra 0970/01).

Delgado, T. C.; Tomaz, A.I.; Correia, I.; Pessoa, J. C.; Jones, J. G.; Geraldes C. F. G. C.; Castro, M. M. C. A. *J. Inorg. Biochem.*. 2005, 99,, 2328.

² Kasuga, N. C.; Sekino, K.; Ishikawa, M.; Honda, A.; Yokoyama, M.; Nakano, S.; Shimada, N.; Koumo, C.; Nomiy, K. *J. Inorg. Biochem..* **2003**, 96, 298.

29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

¹Instituto de Química, Universidade de Brasília, Brasília (DF)

²Laboratório de Materiais Inorgânicos - Universidade Federal de Santa Maria – Santa Maria (RS)

³Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos (SP)

⁴Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo, São Carlos (SP)