

Síntese e estrutura cristalográfica da metanona-bisbenzimidazol (MeBBI)

Fabrizio Gava Menezes (PG), Fábio da Silva Miranda (PG), Juliano Vicente (PG), Norberto Sanches Gonçalves (PQ) e César Zucco (PQ)*

* czucco@qmc.ufsc.br

Departamento de Química – Universidade Federal de Santa Catarina CEP 88040-900

Palavras Chave: MeBBI, síntese, estrutura cristalográfica

Introdução

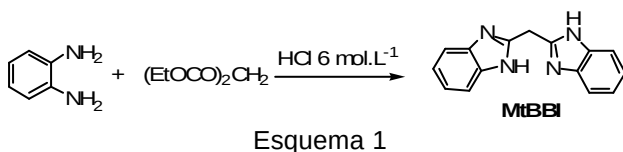
Ligantes heterociclos derivados do bisbenzimidazol (**BBI**), assim como seus complexos de coordenação com metais, têm se mostrado de extrema valia em aplicações de âmbito tecnológico, especialmente na medicina e indústria.

Na busca por complexos de ferro de derivados de **BBI**, foi estudada a reação entre o metileno-bisbenzimidazol (**MtBBI**) e perclorato de ferro, $\text{Fe}(\text{OCl}_4)_2$. Surpreendentemente, foi isolado da reação o composto metanona-bisbenzimidazol (**MeBBI**), formado pela oxidação do grupo metileno. O composto MeBBI praticamente não é citado na literatura.

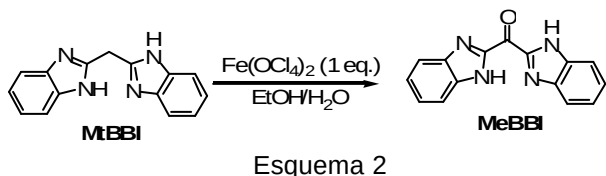
O objetivo do presente trabalho é mostrar como foi obtido e caracterizado o **MeBBI**. Dados cristalográficos também serão discutidos.

Resultados e Discussão

O reagente de partida, **MtBBI**, foi obtido a partir da reação de 1.2-fenilenodiamina e dietilmalonato, na presença de HCl 6 mol. L^{-1} (esquema 1). O rendimento da reação foi 85 %, sendo o **MtBBI** recristalizado em etanol/água e caracterizado por RMN de ^1H , RMN de ^{13}C , IV e cristalografia de raio-x.



O **MtBBI** dissolvido em etanol/água quente foi colocado para reagir com $\text{Fe}(\text{OCl}_4)_2$ (esquema 2).



O sistema foi colocado em temperatura ambiente e após 2 dias sob agitação, forneceu um precipitado de coloração marron-castanha que, após recristalização em DMF, gerou cristais azul-esverdeados, 30ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

caracterizados por RMN de ^1H e de ^{13}C , CHN, IV e cristalografia de raio-x. O rendimento da reação foi de 30 %.

A formação inesperada do **MeBBI** está sendo reestudada, principalmente em função do baixo rendimento e da expectativa de se usar esse composto em novas transformações. A possibilidade de adições à carbonila cetônica que une os dois grupos **BBI** é o alvo de testes em andamento.

Análise de Cristalografia de Raio-x do MeBBI: A figura 1 apresenta a estrutura cristalográfica (Zortep) do **MeBBI**. Os dois grupos **BBI** juntamente com a carbonila que os une formam um plano. Existe uma ligação de hidrogênio intramolecular N20H-N3 (lado oposto à carbonila) medindo 2,04 Å. A ligação C1=O1 da carbonila mede 1,226(2) Å e o carbono carbonílico faz um ângulo de 120,76(17) Å entre C2 e C12, ou seja, entre os dois grupos **BBI**.

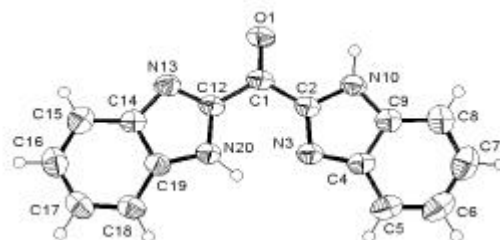


Figura 1. Zortep de (**MeBBI**).

O empacotamento do **MeBBI** (célula unitária) é estabilizado por ligações de hidrogênio intermoleculares envolvendo N10H e N13, onde uma molécula se liga a outras duas, de modo que se formem duas “pilhas de moléculas”.

Conclusões

O **MeBBI** foi obtido, com 30 % de rendimento, a partir da reação entre **MtBBI** e perclorato de ferro, em etanol/água. Os dados da estrutura de cristalografia de raio-x são interessantes, especialmente, a planaridade da molécula e o empacotamento bastante simétrico do sistema.

Agradecimentos

UFSC, CAPES e CNPq.