

Espectro de infravermelho com transformada de Fourier do ácido tiobarbitúrico: Estudo de tautomerismo.

Anilton C. Costa Júnior^{1,2} (PG), Grisset Faget Ondar^{1*}(PQ) Joanna M. Ramos^{1,3} (PG), Claudio A. Téllez¹, Otávio Versiane^{2,3} (PQ), grissetfaget@yahoo.com.br

¹Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Departamento de Química, Outeiro de São João Batista s/n – Campus do Valonguinho - Centro – Niterói – RJ, CEP:24020-150.

²Instituto Federal do Rio de Janeiro, Rua Senador Furtado, 121 - Maracanã – Rio de Janeiro, RJ, CEP:20270-021.

³Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Química.

Palavra Chave: Ácido tiobarbitúrico, infravermelho, tautomerismo.

Introdução

A química dos complexos metálicos de ligantes biologicamente importantes é um campo de contínua pesquisa porque seu estudo permite compreender o papel do ligante nos sistemas biológicos e pode aportar conhecimentos adicionais para o desenvolvimento de novos agentes de interesse terapêutico baseados em centros metálicos. [1] O ácido tiobarbitúrico e seus derivados são compostos biologicamente ativos, cuja química de coordenação esta sendo amplamente pesquisada por serem os complexos metálicos muito importantes na detecção e identificação de fármacos barbituratos, freqüentes em composições farmacêuticas. [2,3]

O ácido tiobarbitúrico apresenta uma estrutura similar ao ácido barbitúrico com a vantagem de exibir vários centros de coordenação: através dos átomos de nitrogênio desprotonados, dos oxigênios da carbonila, dos CH₂ desprotonados e através do enxofre; estas características permitem que formem uma ampla variedade de complexos metálicos tanto mono como poli nucleares. [4].

Resultados e Discussão

A evidência experimental da presença de tautomerismo está no fato de se ter observado no espectro de infravermelho as absorções correspondentes aos estiramentos -OH (3563 cm⁻¹); N-H (3111 cm⁻¹); C-H (2940, 2920, 2886 e 2870 cm⁻¹), e duas bandas correspondentes ao estiramento da ligação S-H (2566 e 2520 cm⁻¹). Uma banda larga centrada aos 1701 cm⁻¹, com estrutura de triplete (1719, 1701 e 1685 cm⁻¹), se atribui à presença dos grupos -C=O presentes nos dois tautômeros. A Figura 1 ilustra as estruturas tautoméricas do ATB.

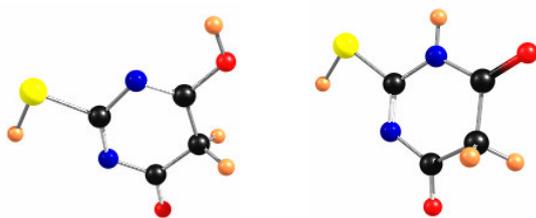


Figura 1: Estrutura tautomérica do ATB.

A Figura 2 ilustra o espectro infravermelho 4000 – 370 cm⁻¹, de onde se desprende a presença da estrutura tautomérica do ácido tiobarbitúrico.

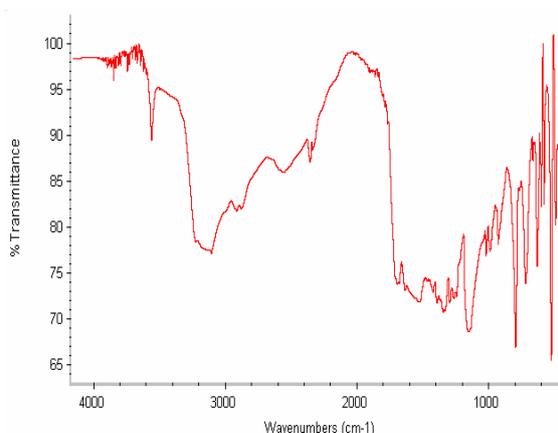


Figura 2: Espectro infravermelho com transformada de Fourier do ATB.

Conclusões

Neste estudo, através do espectro infravermelho com transformada de Fourier e por meio dos espectros de Ressonância magnética nuclear, constatou-se a presença dos tautômeros (I) e (II) no estado sólido da amostra comercial do ácido.

Agradecimentos

Agradecimento ao CNPq e em especial à FAPERJ pelo apoio ao projeto E-26/150608/2006 coordenado pelo Prof. Cláudio Téllez.

[1] - Merrit H. H, Putnam T. J. A new serie of anticonvulsant drug tested by experiments on animals . Trans Am Neurol Assoc 1937; 63: 123-8.

[2] - Zenat M., Gahad G. Spectral and thermal studies of thiobarbituric acid complexes. Spectrochimica Acta. Part A 56 (2000) 1245 – 1250

[3] - Kazuaki Y., Makiko K., Akira F., Masakazu K., Sumio K. Cobalt (III) promoted ligand fusion reaction fo thiobarbituric acid and 4,6-diamino-2-thiouracil (or 4-amino-2-thiouracil). Inorganic Chimica Acta 332 (2002)115-122.

[4] - Funda S., Ilknur D. Determination of energy barriers and racemization mechanisms for thermally interconvertible barbituric and thiobarbituric acid enantiomers. Tetrahedron: Asymmetry 14 (2003) 1857-1864.