

Síntese, Caracterização e Estrutura Cristalina de um Novo Complexo contendo um ligante Nitronaftoquinona

Leonardo Fillipe de Souza e Souza¹(IC), Amanda Neves(PG), Annelise Casellato^{1*}(PQ),
Marciela Scarpellini² (PQ), Maria D. Vargas¹(PQ)

¹ Laboratório de Síntese Organometálica, Universidade Federal Fluminense, Centro de Estudos Gerais, Instituto de Química- Niterói, RJ ² Laboratório de Desenvolvimento de Compostos Bioinorgânicos, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química- Rio de Janeiro, RJ

Palavras Chave: complexos de cobre, naftoquinonas e atividade biológica

Introdução

Estudos mostram que compostos derivados de nitronaftoquinonas atuam como uma droga eficiente no tratamento antialérgicos.¹ O composto 2-hidroxi-3-nitro-1,4-naftoquinona mostrou um potencial de inibição de *passive cutaneous anaphylaxis* (PCA), que é um tipo severo de hipersensibilidade alérgica no corpo de humanos e mamíferos causado por picadas de insetos, ingestão de alimentos e uso de medicamentos. Uma outra possível aplicação biológica de compostos semelhantes tem sido empregue no desenvolvimento de Pro - Drogas Ativadas por Hipóxia (PDAH's)². Neste sentido descreve-se o primeiro complexo de cobre contendo o ligante 2-hidroxi-3-nitro-1,4-naftoquinona além da sua caracterização através de técnicas espectroscópicas, eletroquímicas e difração de raios X.

Resultados e Discussão

O complexo **1** foi sintetizado a partir da reação do ligante 2-hidróxi-3-nitro-1,4 naftoquinona (0,5 mmol), L_{NO_2} , e o sal $Cu(OAc)_2$ (0,25mmol) em metanol na presença de trietilamina. No espectro no infravermelho do ligante L_{NO_2} foi possível identificar as bandas relativas aos estiramentos dos grupos carbonila (1171 cm^{-1}), nitro (1523 e 1347 cm^{-1}), OH, (3335 cm^{-1}) presentes no ligante e após a reação de complexação observou-se a ausência da banda relativa à carbonila enquanto as outras permaneceram. O espectro UV-Vis apresentou somente as bandas que foram atribuídas às transições eletrônicas em 442 nm (grupo nitro), 291, 261, 230 (transições referentes ao ligante)

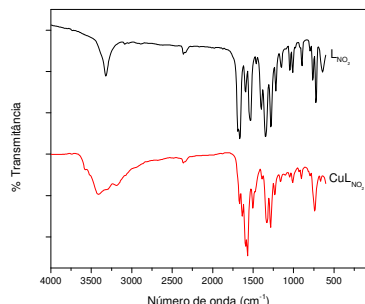


Figura 1: Espectros no infravermelho do ligante e do complexo.

32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

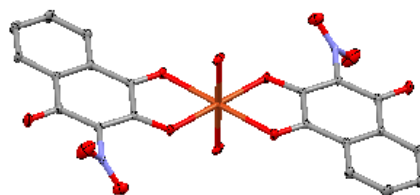


Figura 2: Estrutura do complexo 1.

A análise do comportamento eletroquímico foi realizada por voltametria cíclica e pode ser observado que a complexação do ligante ao centro metálico causou uma deslocamento catódico do processo *quasi-reversível* de redução do ligante que passa de -1571 para -1650 mV vs Fc/Fc^+ no complexo. Um novo processo irreversível atribuído ao processo $Cu^{II} + e^- \rightarrow Cu^I$ foi observado em $E = -619\text{ mV vs } Fc/Fc^+$.

O estudo de difração de raios X mostrou que a estrutura do complexo sendo octaédrica distorcida onde duas moléculas do ligante estão coordenadas ao Cu^{II} através de uma carbonila ($Cu^{II}\cdots O_{CO}\ 2,30\text{Å}$) e do grupo $-OH$ desprotonado ($Cu^{II}\cdots O\ 2,009\text{Å}$) nas posições equatoriais, além de duas moléculas de água ($Cu^{II}\cdots O_{H_2O}\ 1,958\text{Å}$) nas posições axiais.

Conclusões

Obteve-se um novo complexo devidamente caracterizado e que teve sua estrutura de raios X determinada. A síntese e caracterização de outros complexos com diferentes metais se encontra em andamento. E a partir dos estudos eletroquímicos e de atividade biológica se espera obter uma correlação entre esta atividade e os potenciais dos compostos.

Agradecimentos

PBIC/CNPq, LRDx, PRODOC/CAPES, FAPERJ

¹Wang B., Miao Z., Chen R., Heteroatom Chemistry, **2007**,18, 360.

² Probreback. E. G., Chen C. C., Journal of Organic Chemistry, **1969**, 35, 281.

³ Buckle D., Cantello B., Smith H., Smith R., Spicer B., Journal of Medicinal Chemistry, **1977**, 20, 1959.