

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE DERIVADOS DO ÁCIDO DE MELDRUM E SEUS COMPLEXOS DE ZINCO.

Giovanna Cardoso Gajo* (IC), Nayara Cristina Tartari(IC), Paulo Teixeira de Sousa Jr.(PQ), Luiz Everson da Silva¹(PQ). *jovasg@yahoo.com.br

Universidade Federal de Mato Grosso, Laboratório de Pesquisa Química em Produtos Naturais - Departamento de Química, Av. Fernando Corrêa, s/nº, Campus Universitário, 78060-900, Cuiabá, MT

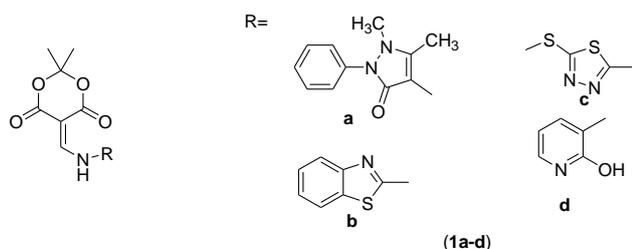
Palavras Chave: heterociclos, ácido de Meldrum, zinco.

Introdução

O estudo de compostos heterocíclicos desperta um grande interesse dentro da síntese orgânica, uma vez que possuem representantes em várias ramificações da indústria, sendo empregados como corantes, na indústria agroquímica e na química medicinal¹. Os pirazóis e benzotiazóis têm sido alvo de muitos estudos devido a sua diversidade de aplicação, propriedades físico-químicas e métodos sintéticos^{2,3}. Esses compostos aliam atividade antiinflamatória, analgésica e antipirética, por isso, são eficazes no controle da dor. Por outro lado são modestos os estudos conduzidos com o ácido de Meldrum do ponto de vista farmacológico bem como sua aplicação em química de coordenação. Sendo assim, neste trabalho descrevemos a complexação de derivados heterocíclicos do ácido de Meldrum com zinco e cobre(II).

Resultados e Discussão

A síntese dos ligantes foi conduzida através da reação do intermediário 5-metoximetileno-2,2-dimetil-1,3-dioxano-4,6-diona com os derivados **1a-d**. Em seguida estes compostos foram complexados com Zinco e Cobre II.



Caracterização dos compostos **1a-d** por RMN ¹H

No composto **1a** o sinal das metilas do anel do Ácido de Meldrum aparece em 1,76 ppm como um singlete integrando 6 hidrogênios, indicando que as mesmas encontram-se no mesmo ambiente químico. Dois singletos do anel pirazolônico aparecem em 2.32 ppm referente à metila ligada ao carbono sp² (C-CH₃) e a mais desblindada (3.10 ppm) ligada ao nitrogênio (N-CH₃), um conjunto de sinais na faixa de 7.31 - 7.50 referente ao anel aromático são também observados. No composto **1b** se observa um singlete em 1.76 ppm referente as metilas do anel do Ácido de Meldrum. Um duplo dubleto em 7.05 ppm com constante de acoplamento de 2 hidrogênios do anel aromático, que acopla com um sinal semelhante em 7.73 ppm. o sistema HN e HC=C aparece em 9.0 e 11.53 ppm

com J=12.6 Hz. Sinais característicos da condensação também podem ser observados no RMN de ¹H do derivado **1d**. O sistema NH e HC=C aparece em 8.53 e 11.25 com constante de acoplamento em torno de 13,5-14 Hz.

Caracterização dos complexos por Infravermelho

Os complexos foram preparados de acordo com metodologia previamente descrita.⁴ O espectro de IV do composto **1a/Zn** mostra o aparecimento de uma banda em torno de 3400 cm⁻¹ indicando a complexação com o zinco, bem como um deslocamento de bandas de ligação C-O para frequências maiores (1807 cm⁻¹) e C=O para 1720 cm⁻¹. As vibrações referentes às ligações Zn-N estão na região de 640-700 cm⁻¹, bem como as bandas referentes à ligação Zn-O localizadas em 453 e 507 cm⁻¹. No composto **1b/Zn** as bandas de deformação simétrica e assimétrica de N-H estão em destaque em 3356 e 3286 cm⁻¹. Há evidência do envolvimento do oxigênio na ligação Zn-O pela observação de duas bandas em 523 e 430 cm⁻¹. Contudo, um conjunto de bandas em 796-844 cm⁻¹ indicam também o envolvimento do nitrogênio na complexação com o metal (Zn-N). A análise do espectro de IV dos complexos de cobre evidenciaram o envolvimento do oxigênio na ligação Cu-O na faixa de 500 cm⁻¹. E a ligação Cu-N aparece na faixa de 470 cm⁻¹. Adicionalmente, estudos de análise térmica revelaram o envolvimento de uma molécula de água no sítio de coordenação na formação do complexo **1a** com zinco, fato este confirmado pela análise de RMN de ¹H do referido composto de coordenação.

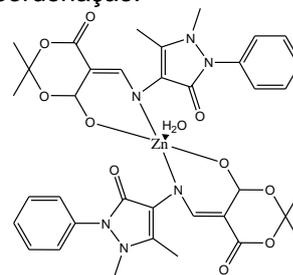


Figura 1. Estrutura Proposta **1a/Zn**

Conclusões

Os compostos sintetizados apresentaram resultados espectrais de IV, RMN de ¹H e de ¹³C compatíveis com as estruturas propostas. Os complexos apresentados neste trabalho são inéditos, além do composto **1c**. A síntese dos complexos mostrou-se simples e com rendimentos moderados. Estudos de ação antiparasitária estão em andamento.

Agradecimentos

Os autores agradecem a FAPEMAT, Capes e CNPq pelo suporte financeiro.

¹MURARO, P. I. R. Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Santa Maria, **2005**.

²ELNADGI, M.H.; Elgemeie, G. E. H.; Abb-Elaal, F. A. *Heterocycles*, **1985**, 23, 3152.

³BORNE, R. F. Nonsteroidal anti – inflammatory drugs. In: Foye, W. O.; Lemke, T. L.; Williams, D. A. (Eds.), *Medicinal Chemistry*. Williams and Wilkins: Baltimore, **1995**, 535.

⁴Macías, B.; Garcías, I. et al. *Z. Anorg. Chem.* **2003**, 629, 255