

Síntese e caracterização de compostos de coordenação de Hg(II) com a base de Schiff derivada da β -alanina com o 2-hidroxinaftaldeído

Viner S. Lima^{1*}(PG), Sérgio M. Soares¹(PG), Sebastião S. Lemos¹(PQ), Claudia C. Gatto¹(PQ)

¹Instituto de Química, Universidade de Brasília, 70904-970 Brasília – DF, Brasil

vinersl@hotmail.com

Palavras Chave: Bases de Schiff, aminoácidos, mercúrio.

Introdução

Bases de Schiff são compostos com crescente importância em diversas áreas, como medicina, bioquímica, catálise, etc. Eles são derivados da condensação de uma amina primária com um aldeído ou cetona e têm sido usados como agentes complexantes devido à grande variedade de formas de complexação possíveis. Apesar da grande quantidade de complexos com essa classe de agentes complexantes, não temos conhecimento de nenhum composto de mercúrio(II) com bases de Schiff derivadas de aminoácidos.

Resultados e Discussão

A reação de N-(2-Hidroxinaftaldeído)- β -alanina (LH₂) com acetato de fenil-mercúrio(II), em acetonitrila, sob refluxo, forneceu o complexo [HgPh(LH)]; enquanto a reação com o acetato de mercúrio(II), em metanol, sob refluxo, forneceu o composto Hg(L)(H₂O)₂. Os produtos foram caracterizados por meio de microanálise (CHN), espectroscopia de infravermelho, espectroscopia de RMN (¹H, ¹³C, ¹⁹⁹Hg) e difração de raios X de monocristal no caso do [HgPh(LH)].

Tabela 1. Algumas bandas de absorção selecionadas nos espectros de infravermelho

Composto	C=N	$\nu_{\text{ass}} \text{COO}$	$\nu_{\text{sim}} \text{COO}$
LH ₂	1643	1546	
[HgPh(LH)]	1638	1576, 1542	1403, 1355
Hg(L)(H ₂ O) ₂	1634	1567, 1542	1403, 1356

*Valores em cm⁻¹

Os espectros de RMN de ¹H e os dados de microanálise (CHN) são condizentes com o ligante atuando na sua forma monoaniônica no [HgPh(LH)] e dianiônica no Hg(L)(H₂O)₂. Os compostos [HgPh(LH)] e Hg(L)(H₂O)₂ apresentam nos espectros de RMN de ¹⁹⁹Hg ressonâncias em -1430.54 e -1419.67, respectivamente.

Os cristais amarelados de [HgPh(LH)], um dos quais foi selecionado para a difração de raios X, foram obtidos por meio da evaporação ao ar de uma solução em tetra-hidrofurano. Sistema cristalino monoclinico, grupo espacial P2₁/c, Z = 4, R₁ = 0,0409, wR₂ = 0,1156.

Conforme mostra a figura 1, o átomo de Hg encontra-se linearmente coordenado aos átomos C15 e O2, com uma distorção da linearidade, Hg–C(15) = 2.041(6) Å, Hg–O(2) = 2.091(4) Å e C(15)–Hg–O(2) = 174.0(2)°. São observadas ainda interações supramoleculares do mercúrio com outros 3 três átomos de oxigênio, da ordem de 2,7Å.

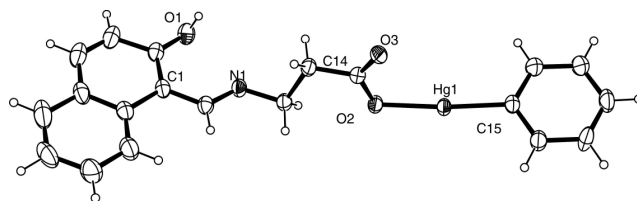


Figura 1. Representação ORTEP da estrutura molecular do complexo [HgPh(LH)]. Elipsóides térmicos representados a 30% da probabilidade.

Até o momento, não foi possível obter cristais adequados para difração de raios X do composto Hg(L)(H₂O)₂.

Conclusões

A difração de raios X revelou que, no composto [HgPh(LH)], o cátion HgPh⁺ está ligado covalentemente com o átomo de oxigênio do carboxilato da base de Schiff, ou seja, o ligante atua na sua forma monoaniônica. Além disso, observa-se três interações secundárias com átomos de oxigênio adicionais, levando a um número de coordenação que pode ser escrito como [2 + 3]¹.

Agradecimentos

FINEP-CT INFRA 0970/01.



¹ Wright, J. G. et al. In *Mercury(II)-Thiolate Chemistry and the Mechanism of the Heavy Metal Biosensor MerR*; Lippard, S. J., ed; Wiley: New York, 1991.

² Amin, R; Krammer, R; Abdel-Kader, N.; Verwanger, T.; El-Ansary, A. *European J. Med. Chem.* **2010**, 45, 372.