

## Caracterização estrutural e avaliação da atividade antibacteriana de complexos de zinco com N-R-sulfonilditiocarbimatos.

Guilherme S. B. Magnabosco<sup>1\*</sup> (IC), Lourival R. Sousa Neto<sup>1</sup> (IC), Silvana Guilardi<sup>1</sup> (PQ), Paula Sevenini Pinto<sup>2</sup> (IC), Daniele Cristiane Menezes<sup>2</sup> (PQ), Mayura M. M. Rubinger<sup>2</sup> (PQ), Marcelo R. L. de Oliveira<sup>2</sup> (PQ). \**magnabosco@qui.ufu.br*

<sup>1</sup> Instituto de Química, UFU, Uberlândia, MG; <sup>2</sup> Departamento de Química, CCE, UFV, Viçosa, MG

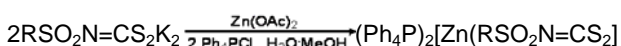
Palavras Chave: Complexos de zinco, ditiocarbimatos, bactericida.

### Introdução

Ditiocarbimatos ( $RR'NCS_2^-$ ) são amplamente usados na agricultura e na indústria da borracha. Recentemente foi descoberta a atividade antifúngica de uma classe estruturalmente semelhante e menos estudada, os ditiocarbimatos ( $RN=CS_2^-$ ) derivados de sulfonamidas<sup>1</sup>. Muitas sulfonamidas apresentam atividade bactericida<sup>2</sup>. Este trabalho apresenta a caracterização estrutural por difração de raios X de dois complexos de zinco contendo ditiocarbimatos, e a avaliação de sua atividade frente às bactérias *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli*.

### Resultados e Discussão

A síntese e caracterização por espectroscopias no infravermelho e de RMN dos complexos **1** e **2** foi apresentada em congressos<sup>3,4</sup>. A sua síntese foi repetida a partir da adição de acetato de zinco diidratado e de cloreto de tetrafenilfosfônio a soluções dos ditiocarbimatos de potássio apropriados solubilizados em H<sub>2</sub>O:MeOH (1:1), (**Figura 1**). As misturas foram agitadas por 1 h e filtradas. Os precipitados obtidos foram lavados com água, com rendimentos de 82 e 91%.



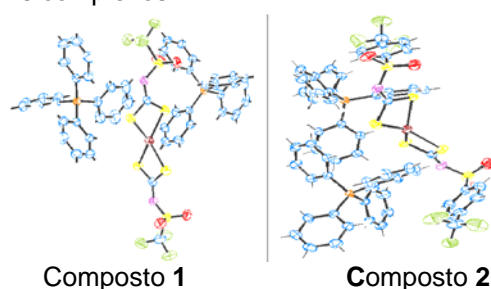
R: (**1**)=CF<sub>3</sub>; (**2**)=4-CF<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>

**Figura 1.** Esquema da síntese dos complexos.

Para recristalização de **1** foi usada solução de diclorometano e etanol (2:1) e para **2**, o método de saturação líquido-vapor (Método 1)<sup>5</sup>, com os solventes metanol e éter etílico.

O composto **1** cristaliza no sistema monoclinico (P2<sub>1</sub>/c) e **2** no sistema triclinico (P $\bar{1}$ ). Em ambos compostos o Zn(II) está coordenado por quatro átomos de enxofre de dois ligantes ditiocarbimato, numa geometria tetraédrica distorcida. Como observado para compostos correlatos<sup>1</sup>, as ligações S-C e C-N apresentam caráter de dupla devido a deslocalização parcial dos elétrons  $\pi$  no fragmento N=CS<sub>2</sub>. A principal diferença entre os dois complexos reside no ângulo de torção C-N-S-C que descreve a conformação do ligante. No empacotamento cristalino, além da ligação iônica,

há interações do tipo C-H $\cdots$ O entre os cátions e os ânions complexos.



**Figura 2.** Representação ORTEP3 dos compostos.

A atividade bactericida dos complexos foi avaliada pelo teste de difusão em ágar contra *S. aureus* e *E. coli*. Na concentração de 250 mmol L<sup>-1</sup>, **1** e **2** foram ativos contra *S. aureus*, com halos de inibição de 1,65 e 1,58 cm, respectivamente, em relação ao controle. Contra *E. coli* foram inativos, indicando modo de ação específica para bactérias Gram-positivas.

### Conclusões

Monocristais de bis(N-trifluorometilsulfonilditiocarbimato)zincato(II) de tetrafenilfosfônio e bis(N-trifluorometilfenilsulfonilditiocarbimato)zincato(II) de tetrafenilfosfônio foram obtidos para estudos por difração de raios X. Nos ânions complexos o cromóforo ZnS<sub>4</sub> apresenta geometria tetraédrica distorcida. Ensaio contra *S. aureus* mostraram que ambos são ativos. Como próxima etapa, será determinada a concentração mínima inibitória contra uma gama de microrganismos patogênicos.

### Agradecimentos

À CAPES, CNPq e FAPEMIG. Ao prof. Dr. Javier Ellena (IFSC-USP) pelas medidas de raios X.

<sup>1</sup> Alves, L. C.; Rubinger, M. M. M.; Lindemann, R. H.; Perpétuo, G. J.; Janczak, J.; Miranda, L. D. L.; Zambolim, L. e Oliveira, M. R. L. *J. Inorg. Biochem.*, **2009**, *103*, 1045.

<sup>2</sup> Maren, T.H. *Annu. Rev. Pharmacol. Toxicol.* **1976**, *16*, 309.

<sup>3</sup> Pinto, P. S.; Rubinger, M. M. M. e Oliveira, M. R. L. *23º Encontro Regional da SBQ - MG*, **2009**.

<sup>4</sup> Pinto, P. S.; Rubinger, M. M. M. e Oliveira, M. R. L. *24º Encontro Regional da SBQ - MG*, **2010**.

<sup>5</sup> Cunha, S. *Química Nova*. **2008**, *31*, 4, 906.