

## Complexação da cumarina clorossulfonada com íons metálicos

Dayany da S. A. Maciel<sup>1\*</sup> (IC); Fabiane L. Ribeiro<sup>1</sup> (IC); Regina M. S. Pereira<sup>1</sup> (PQ)

<sup>1</sup>Universidade Bandeirante de São Paulo, São Paulo, Brasil – email: dayanymaciel-123@hotmail.com

Palavras Chave: Cumarinas, Clorossulfonação, Complexação.

### Introdução

As Cumarinas são metabólitos secundários que apresentam diversas atividades farmacológicas, como atividade antifúngica, antitumoral, vasodilatadora, antileishmaniose, anti-HIV, antiparasitária, entre outras [1]. Cerca de 1.300 cumarinas já foram isoladas de fontes naturais e suas propriedades farmacológicas, bioquímicas e aplicações dependem de seus padrões de substituição. Uma alternativa utilizada para melhorar a atividade biológica e estabilidade das cumarinas é a complexação com metais de transição. Por isso, o objetivo deste trabalho foi modificar a cumarina para possibilitar sua complexação com metais de transição.

### Resultados e Discussão

A cumarina clorossulfonada (**1**) (Fig. 1) foi sintetizada segundo Becker [2] e analisada por espectroscopia no IV e UV-VIS e P.F.

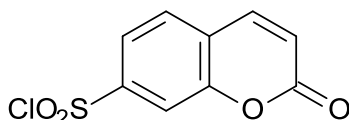


Figura 1. Composto **1** sintetizado segundo Becker<sup>1</sup>.

O espectro no IV de **1** (Fig. 2) apresentou duas bandas  $\nu$ S=O; uma assimétrica em  $1371,02\text{ cm}^{-1}$  e outra simétrica em  $1166,99\text{ cm}^{-1}$ , deslocamento da banda  $\nu$ C=O em  $1703,84$  para  $1731,74\text{ cm}^{-1}$  (Fig. 2). Além disso, apresentou deslocamento das bandas  $\nu$ C=C,  $\nu$ C-O, indicando a clorossulfonação da cumarina. No espectro de UV-VIS (200 a 500 nm) o composto **1** apresentou espectro semelhante ao da cumarina, porém menor intensidade de absorção da banda em  $315\text{ nm}$ .

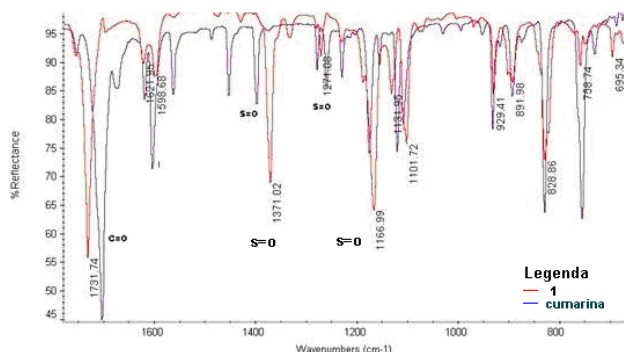


Figura 2. Espectro de IV da cumarina e seu derivado clorossulfonado (**1**).

O composto **1** apresentou ponto de fusão de  $108^\circ\text{C}$ , diferente da cumarina pura ( $71^\circ\text{C}$ ) e 71% de rendimento.

O composto **1** quando na presença dos sais  $[\text{Ni}(\text{SO}_4)\cdot 6\text{H}_2\text{O}]$ ,  $[\text{Co}(\text{SO}_4)\cdot 7\text{H}_2\text{O}]$  e  $[\text{Zn}(\text{CH}_3\text{COO})\cdot 2\text{H}_2\text{O}]$  produz os complexos **2**, **3** e **4**, os quais foram caracterizados por espectroscopia no IV e UV-VIS (Fig. 3) e ponto de fusão.

O rendimento para os complexos **2**, **3** e **4** foi em torno de 70% e os pontos de fusão foram  $210^\circ\text{C}$ ,  $190^\circ\text{C}$  e  $185^\circ\text{C}$ , respectivamente.

No espectro de UV-VIS de cada um dos compostos ( $1\mu\text{M}$ ) o deslocamento de banda mais significativo foi do composto **4**, em que a banda em  $275\text{nm}$  se desloca para  $252\text{nm}$  e as demais desaparecem em um ombro alargado. Os demais complexos, apesar de não sofrerem um deslocamento significativo das bandas, apresentaram uma maior intensidade de absorção.

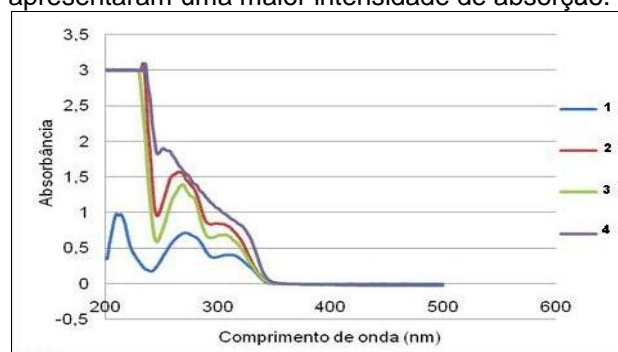


Figura 3. Espectro UV-VIS do composto **1** e seus respectivos complexos metálicos **2**, **3** e **4**.

No espectro de IV os compostos **2**, **3** e **4** apresentam uma diminuição significativa na intensidade das  $\nu$ S=O  $1371,02$  e  $1166,99\text{ cm}^{-1}$ , sugerindo coordenação dos íons nesta posição.

### Conclusões

Uma nova série de compostos metálicos foi obtida, entretanto sua caracterização ainda está sendo finalizada para que possa ser proposta uma estrutura para cada composto.

### Agradecimentos

Universidade Bandeirante de São Paulo - UNIBAN

<sup>1</sup>Simões C.M.O. et al. *Farmacognosia da Planta ao Medicamento*, 5ª edição. Editora UFRGS, 2004.

<sup>2</sup>Becker, Heinz G. O. et al. *Organikum: Química orgânica experimental*. 2ª edição Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1997.

<sup>3</sup>Pavia, Donald L. et al. *Introdução à espectroscopia*. 4ª edição. São Paulo: Cengage Learning, 2010.