

Estrutura molecular e cristalina do tiofenil-2-metilideno-2-aminofenol

Guilherme A.Pereira¹(PG), Alexandre Cuin¹(PQ), Adailton J.Bortoluzzi²(PQ), Antonio C.Massabni³(PQ)

¹ Dep Química, Instituto de Ciências Exatas, UFJF, Juiz de Fora, MG, Brasil

² LABINC – Dep Química, UFSC, Florianópolis, SC, Brasil

³ Dep Química Geral e Inorg, Instituto de Química, UNESP, Araraquara, SP, Brasil

alexandre.cuin@ufjf.edu.br e alexandre_cuin@yahoo.com

Palavras Chave: Bases de Schiff, coagulantes, bactérias, fungos

Introdução

Bases de Schiff são compostos que contêm o grupo (RC=N-), as quais são formadas pela condensação de uma amina primária com o grupo carbonila de um aldeído ou uma cetona. No presente estudo, a base de Schiff é tiofenil-2-metilideno-2-aminofenol, nomeada IminaOH (C₁₁H₉NOS). Visto que as bases de Schiff contêm S-, N-, e/ou átomos O- doadores, elas têm sido amplamente utilizadas como ligantes na química de coordenação [1], mostrando-se promissoras em aplicações no campo biológico, por exemplo, como potentes anticoagulantes [2], além de apresentar propriedades antifúngicas e antibacterianas quando associadas a íons metálicos. As bases de Schiff têm sido bastante estudadas devido à suas interessantes propriedades, como a habilidade de complexar com alguns metais tóxicos, habilidade catalítica e uma elevada afinidade de quelação em metais de transição [3]. Neste trabalho é descrito a obtenção e caracterização deste composto por análise elemental (CHNS), RMN de ¹³C e ¹H e IV (4000 a 400 cm⁻¹). Além da descrição molecular, há a descrição da estrutura cristalina determinada por difratometria de raios X.

Metodologia

Este composto foi obtido a partir da reação direta entre o 2-aminofenol e 2-carboxi-aldeído-tiofeno, sob refluxo e agitação, a 90 °C durante 2 horas. Após esse período, teve seu volume reduzido e, o óleo formado foi dissolvido em diclorometano e, em seguida, tratado com Na₂SO₄ anidro para remoção da água formada na reação inicial. Por fim, o produto obtido da filtração foi redissolvido em metanol, e após algumas horas observou-se a formação de cristais. A síntese está descrita na figura 1.

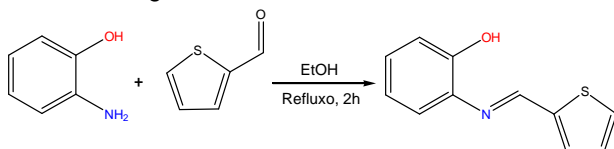


Figura 1. Esquema de síntese da IminaOH.

Resultados e Discussão

Através dos resultados de análise elemental (CHNS), a fórmula mínima para a IminaOH é C₁₁H₉NOS (MM 203.1 gmol⁻¹). Os dados estão descritos na Tabela 1.

Tabela 1: Resultados de CHNS para IminaOH

Imina OH	Calculado (%)				Experimental (%)			
	C	H	N	S	C	H	N	S
	65,0	4,5	6,9	15,8	65,0	4,3	6,7	15,5

A estrutura cristalina da base de Schiff é descrita na Figura 2

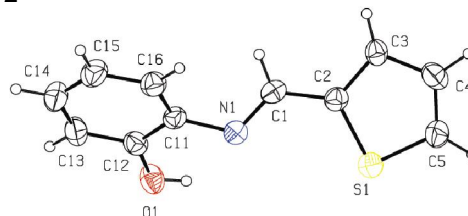


Figura 2. Projeção ORTEP do ligante IminaOH.

Através da RMN de ¹³C é possível observar picos em 153,4; 150,5; 142,9 e 137,9 ppm referentes a C1, C2 (C_{Ar}-OH), C11 e C2 (S-C-CN), respectivamente. Outros picos referentes ao anel benzênico e ao tiofeno são: 132,9, 130,9, 128,0, 126,9, 120,4, 119,5 e 116,1 ppm. No espectro de IV foram observadas bandas na região de 1606 cm⁻¹ referente ao estiramento característico do grupo N=CHR, em 3063 cm⁻¹ atribuído à frequência de estiramento ν_{O-H} e bandas entre 1354 e 1419 referentes às ligações C=C dos anéis aromáticos.

Conclusões

Este trabalho descreve a síntese da base de Schiff IminaOH bem como a devida caracterização por diversas técnicas usuais e por difratometria de raios X.

Agradecimentos

FAPEMIG, FAPESP, UFJF, UFSC e UNESP.

1 Mohamed GG, Omar MM, Hindy AM (2005) Spectrochim. Acta-Part A-Mol. and biomol. Spectroscopy, 62(4-5) 1140

2 Mochizuki A, et al. (2008) Bioorg. & Med. Chem. Letters 18(2) 782.

3 Mohamed GG, et al. (2006) Turkish J.Chem. 30(3) 361.