

Avaliação estrutural de complexos de cobre(II) derivados de bases de Schiff contendo o núcleo quinolínico com potencial atividade biológica.

Vanessa S. Zanon^{1,*} (PG), Jackson A. L. C. Resende¹ (PQ), Maria D. Vargas¹ (PQ).
vanessa.szanon@gmail.com

¹Instituto de Química, Outeiro de São João Batista, s/n° - Campus do Valonguinho Centro, 24020150, Niterói-RJ.

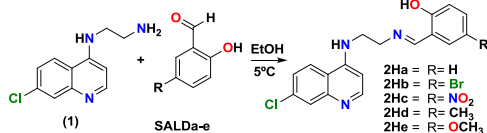
Palavras Chave: aminoquinolina, bases de Schiff, complexos de Cu²⁺.

Introdução

Derivados do núcleo quinolínico apresentam amplo espectro de atividades farmacológicas: antimalárica,¹ bactericida e antifúngica.² Por outro lado bases de Schiff derivadas de salicilaldeídos exibem atividades antifúngica, bactericida, antimalárica e antiviral.³⁻⁵ Abaixo descrevem-se as sínteses de novas bases de Schiff (BS) contendo estes dois núcleos e dos seus complexos de Cu²⁺, visando compostos mais ativos que seus precursores.

Resultados e Discussão

As bases de Schiff **2Ha-e** foram preparadas através da condensação de **1** com **SALDa-e** (60-81%, **Esq. 1**) e caracterizadas por AE, espectroscopia de RMN de ¹H e ¹³C, HSQC, HMBC, COSY e no IV. Nos espectros de RMN de ¹H de **2Ha-e**, o H da imina ($\delta = 8,70-8,60$) comprova a formação dos produtos.

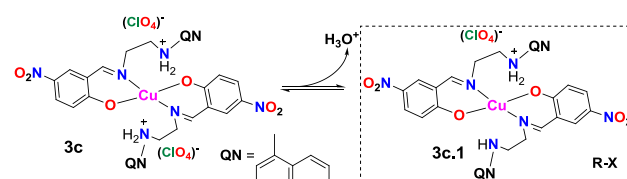


Esquema 1. Síntese das bases de Schiff **2Ha-e**.

Os complexos **3a-e** foram obtidos (84-75%) das reações de **2Ha-e** com Cu(ClO₄)₂·6H₂O (2:1, MeOH, 45°C). Os produtos, de coloração verde (**3c**) ou parda (**3a-b** e **3d-e**), têm composição [Cu(**2Ha-e**)₂](ClO₄)₂, de acordo com os dados de AE. Os deslocamentos das $\nu_{C=N}$ e $\nu_{C=O}$ nos espectros IV (**3a-e** vs **2Ha-e**) sugerem complexação através do N imínico e do O do fenolato. Nos espectros de **3a-e** observa-se a banda característica do ClO₄⁻ não coordenado. Os dados indicam que em **3a-e** os N amínicos encontram-se protonados (isto é que atuaram como bases na desprotonação do fenol), como em complexos análogos de Cu²⁺,⁶ as cargas positivas sendo neutralizadas por dois ClO₄⁻.

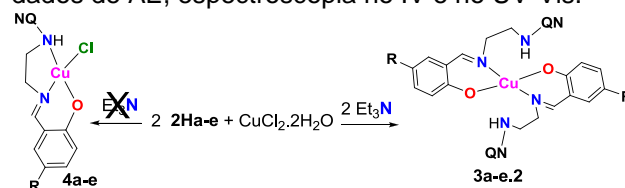
Monocristais do complexo de **2c** foram obtidos da solução mãe e submetidos a um estudo de difração de raios X. Um estudo preliminar mostrou que a estrutura apresenta o átomo de Cu coordenado como proposto e com geometria QP distorcida, possivelmente devido à interação π entre os anéis da quinolina e do fenolato. Observa-se apenas um ClO₄⁻ por Cu²⁺ na estrutura indicando que somente um dos N amínicos encontra-se protonado (**Esq. 2**) em [Cu(**2Hc**)(**2c**)](ClO₄) **3c.1**. Propõe-se, portanto,

que em solução (MeOH/H₂O), o produto **3c** tenha sido desprotonado pela água, fornecendo **3c.1** que é mais solúvel que **3c** nessas condições.



Esquema 2. Proposta para a formação de **3c.1**.

Os complexos correspondentes neutros [Cu(**2a-e**)₂] **3a-e.2**, 66-91% (**Esq. 3**) foram obtidos das reações de **2Ha-e** com CuCl₂·2H₂O e 2 equiv. Et₃N (MeOH, 45°C). Na ausência de Et₃N formaram-se os complexos [Cu(**2a-e**)Cl] **4a-e**, 60-89%, de acordo com os dados de AE, espectroscopia no IV e no UV-Vis.



Esquema 3. Síntese dos complexos **3a-e.2** e **4a-e**.

Os espectros no UV-Vis (DMSO) de todos os complexos são semelhantes e apresentam bandas intensas em 360 nm (TCML) e 400 nm (cuja intensidade depende do grupo R), e outra menos intensa em ~ 650 nm (transição d-d),⁶ sugerindo mesma geometria de coordenação. Nos espectros de **4a-e** a banda de transição d-d encontra-se deslocada para o vermelho (~ 700 nm).

Conclusões

As reações entre as bases de Schiff **2Ha-e** e sais de Cu²⁺ (2:1) são sensíveis à natureza do contraíon e à presença de base no meio. As atividades bactericida e fungicida dos complexos encontram-se sob investigação.

Agradecimentos

PIBIC-UFF

CNPq

FAPERJ

¹Tanos, C. C. F.: et al, *Quim. Nova*, **2008**, *31*, 1271.

²De Souza, M. V.: et al, *Bioorg. Med. Chem.* **2009**, *17*, 1474.

³da Silva, C. M.: et al, *J. Adv. Res.* **2011**, *2*, 1.

⁴Bringmann, G.: et al, *J. Nat. Prod.* **2004**, *67*, 743.

⁵de Souza, A.: et al, *Quim. Nova*, **2007**, *30*, 1563.

⁶Bhaumik, P.K.: et al, *Polyhedron*, **2013**, *62*, 179.