

Síntese e caracterização de complexos metálicos com ligantes chalconas e seus derivados.

David Vinícius Arruda

Prof. Dr. Javier Ellena

Dr. Pedro H. O. Santiago

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo - IFSC/USP
arrudavid@usp.br

Objetivos

A realização da síntese e caracterização de chalconas e derivados, utilizando técnicas analíticas de espectroscopia vibracional no infravermelho (FTIR), e técnicas de análises térmicas (TG e DSC). Além disso, a técnica de difração de raios X em monocristal buscando elucidar a estrutura cristalina do composto. E dessa forma avaliar a viabilidade da síntese de complexos metálicos com possível atividade biológica.

Métodos e Procedimentos

Foram sintetizados três novas moléculas ao longo do projeto, sendo uma chalcona obtida por meio de uma condensação de Claisen-Schmidt com catálise ácida em refluxo ao longo de 24 horas.

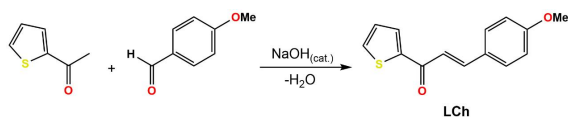


Figura 1: Esquema de síntese da chalcona LCh.

A síntese de duas hidrazonas derivadas de uma chalcona, foram obtidas por meio de uma condensação com duas hidrazidas distintas, com catálise ácida e em refluxo por 3 horas cada. Todos os produtos foram separados pela cristalização via evaporação lenta de solvente, levados para as técnicas de análise disponíveis.

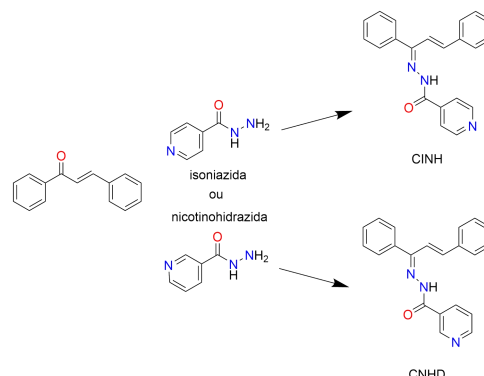


Figura 2: Esquema de síntese das hidrazonas.

Resultados

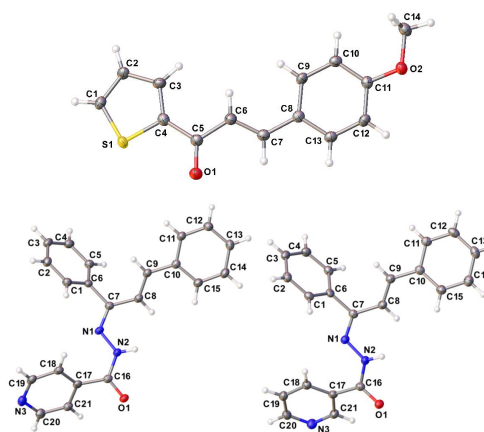


Figura 3: Desenho ORTEP da estrutura da chalcona LCh (cima) e para as hidrazonas CINH (esquerda) e CNHD (direita). Elipsóides térmicos representados com 50% de probabilidade.

Composto	LCh	CINH	CNHD
Fórmula Molecular	C ₁₄ H ₁₂ O ₂ S	C ₂₁ H ₁₇ N ₃ O	C ₂₁ H ₁₇ N ₃ O
Sistema Cristalino	Monoclínico	Triclínico	Monoclínico
Grupo Espacial	P2 ₁	P-1	P2 ₁ /c
a (Å)	4,0172(1)	7,0078(1)	8,96808(12)
b (Å)	10,0188(2)	9,3614(2)	16,5017(3)
c (Å)	14,4791(3)	13,0704(2)	10,90273(16)
α (°)	90	92,2590(10)	90
β (°)	92,807(2)	104,1780(10)	96,8414(13)
γ (°)	90	103,0130(10)	90
Z	2	2	4
Temperatura	100 K	100 K	100 K
Radição	Cu Kα	Cu Kα	Cu Kα
Resolução (Å)	0,82	0,82	0,82

Tabela 1: Dados cristalográficos dos compostos sintetizados.

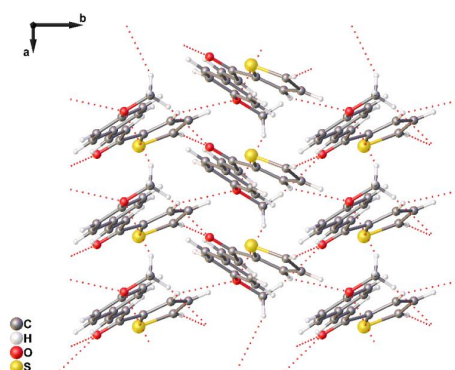


Figura 4: Arranjo supramolecular da estrutura cristalina da chalcona LCh no plano *ab*.

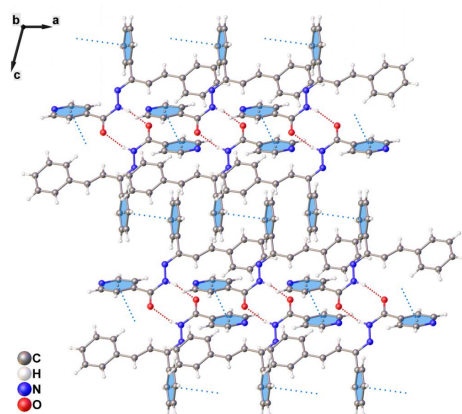


Figura 5: Arranjo supramolecular da estrutura cristalina da hidrazona CINH no plano *ac*.

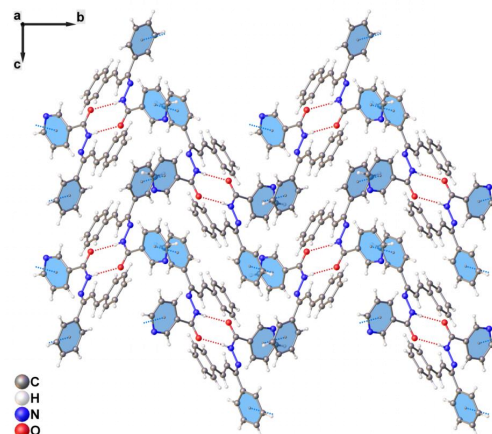


Figura 6: Arranjo supramolecular da estrutura cristalina da hidrazona CNHD no plano *bc*.

Conclusões

A chalcona sintetizada foi caracterizada com sucesso, entretanto avaliando sua estrutura é notável que existem poucas regiões favoráveis para a formação de complexos, dessa forma foram sintetizadas duas hidrazonas derivadas de uma segunda chalcona, essas hidrazonas também foram caracterizadas e a presença dos nitrogênios em conjunto com a carbonila torna a molécula mais interessante para trabalhar com a síntese de complexos metálicos com possível atividade biológica, sendo essa a próxima etapa do projeto.

Referências

- 1- Benite, A. M. C.; et al., Rev. Eletrônica Farmácia. 2007, 4, 131.
- 2- Zhuang, C.; et al., Chem Rev 2017, 117, 7762.
- 3- Mahapatra DK, et al. Eur J Med Chem. 2019 Jul 15;174:142-158.

Agradecimentos

