



SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA DO COMPLEXO $Zn(Valp)_2(Nic)_2$

Jacqueline Rodrigues (BIC-UCS), Carla Peron, Paulo Roberto dos Santos, Sidnei Moura e Silva (Orientador(a))

Modificações moleculares como a complexação de moléculas orgânicas com metais, tem recebido atenção nos últimos anos. Complexos metálicos de fármacos obtiveram melhorias significativas em suas ações terapêuticas. O valproato de sódio ou Valp, é um fármaco utilizado no tratamento de convulsões, transtornos bipolares e tratamento de enxaquecas, o qual apresenta alta afinidade com metais de transição e produz compostos de coordenação quimicamente estáveis. A nicotinamida ou Nic, é um dos componentes do complexo vitamínico B3, com funções de regulação de processos metabólicos de produção de energia a nível celular, redutor de estresse oxidativo e agente inibidor de processos inflamatórios. A síntese do complexo $Zn(Valp)_2(Nic)_2$ ocorreu em dois passos. No passo 1, para a obtenção do precursor $Zn_2(Valp)_4$, uma massa de 4,6508g de 2-propilpentanoato de sódio (valproato) (28 mmol) foi dissolvida em 100 mL de H₂O Milli-Q. Uma segunda solução preparada com 4,0255 g ZnSO₄.7H₂O (14 mmol) e 100 mL de H₂O Milli-Q foi adicionada gota a gota sobre a primeira sob agitação magnética constante à temperatura ambiente, por 24 h de agitação, o produto sólido foi recuperado por filtração a vácuo, lavado com H₂O Milli-Q e seco em liofilizador por 24 h, obtendo um rendimento de 71%. No passo 2 uma massa de 0,7036 g de precursor $Zn_2(Valp)_4$ (1 mmol) foi solubilizada em 50 mL de etanol absoluto e filtrada. Uma solução contendo 0,4885 g de nicotinamida (4 mmol) em 50 mL de etanol absoluto foi adicionada gota a gota sobre a solução do precursor sob agitação magnética constante, por 2 h. Em seguida foi concentrada à 25% do volume inicial e reservada para cristalização. A solução foi mantida em repouso à temperatura ambiente com o frasco fechado. Uma massa cristalina foi obtida após 60 h de repouso, a qual foi recuperada por filtração à vácuo, lavada duas vezes com etanol absoluto para remoção de material não reagido e secados em liofilizador por 24 h, com rendimento de 70%. O monocristal do complexo foi obtido a partir de uma solução saturada preparada em etanol absoluto (5 mL) e 0,1 g do complexo amorfo aquecida à 50 °C e filtrada em membrana de poliamida 0,45 µm de porosidade e acondicionada em um tubo de ensaio de 10 mL de capacidade coberto com papel filtro para propiciar a evaporação do solvente, e armazenado ao abrigo de luz e temperatura ambiente. Os monocristais cresceram nas paredes do tubo após 7 dias. O complexo metálico e seu sal precursor foram analisados pelas técnicas de FTIR, 1HRMN, 13CRMN, ESI-TOF-MS e UV-Visível e comparados com os dados da literatura. A análise por difração de Raios-X de monocristal foi aplicada apenas para o complexo ternário.

Palavras-chave: Zinco, valproato, complexo

Apoio: UCS, CNPq, CAPES