

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UNA BASE DE SCHIFF DERIVADA DE SULFAQUINOXALINA Y 5-BR-SALICILALDEHÍDO

Cristian Villa-Pérez, Juan F. Cadavid-Vargas, Ana L. Di Virgilio y D. Beatriz Soria

¹ CEQUINOR, Departamento de Química, UNLP – CONICET, La Plata, Argentina.
cristianvilla@quimica.unlp.edu.ar



INTRODUCCIÓN

Con el objetivo de obtener nuevos ligandos derivados de las sulfonamidas, se llevó a cabo la síntesis de una nueva base de Schiff. Este tipo de compuestos son productos formados en la condensación de una amina primaria (-NH₂) y un grupo carbonilo (-C=O) proveniente de un aldehído o una cetona. El interés en éstas radica, en que han demostrado ser ampliamente eficaces en varios campos de aplicación. Muchas bases de Schiff han mostrado tener una notable actividad antibacteriana, antifúngica, contra el cáncer y diurética, aplicaciones en las que se ha demostrado la importancia del enlace imino (C=N) en la estructura [1].

Las bases de Schiff están involucradas en diversos procesos metabólicos, como la formación de tejidos, la bioquímica de la visión y numerosas reacciones enzimáticas [2]. El compuesto E-((4-(5-bromo-2-hidroxibenciliden)amino)fenil)sulfonyl)(quinxalin-2-il)amida de sodio se obtuvo a partir de la condensación en reflujo de Sulfaquinoxalina sódica y 5-bromosalicilaldehído (5Br-Sal), en relación estequiométrica 1:1 y usando 2-propanol como solvente

OBJETIVOS

- » Preparar una base de Schiff polidentada con potencial uso en la síntesis de compuestos de coordinación con potenciales propiedades biológicas.
- » Caracterizar el compuesto obtenido mediante diferentes técnicas instrumentales: RMN, UV-Vis, FTIR, calorimetrías.
- » Hacer una evaluación preliminar de su actividad biológica frente a la línea tumoral A549.



SÍNTESIS

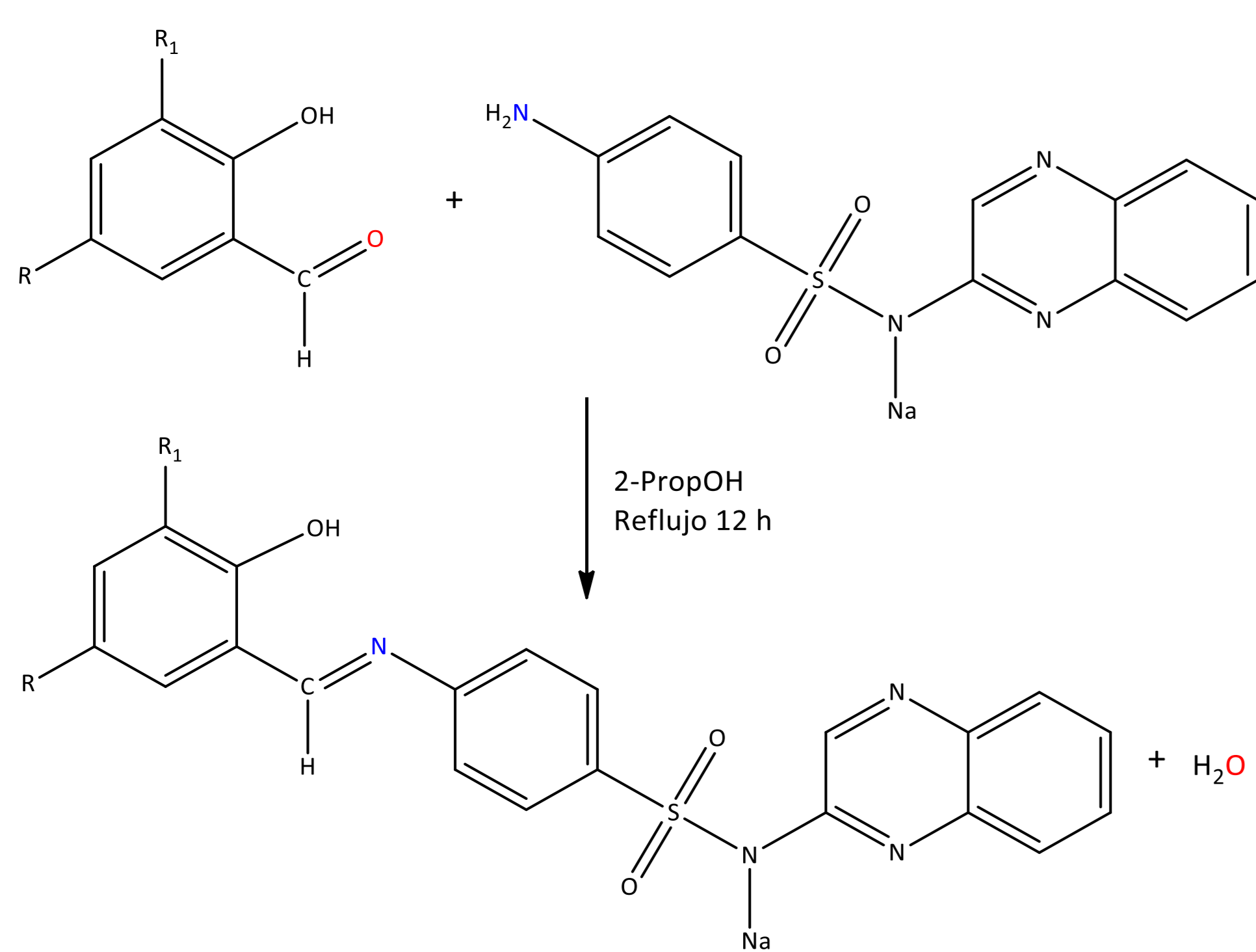


Figura 1. Reacción propuesta para la síntesis.

El resultado de esta reacción fue un precipitado de color rojo que fue lavado varias veces con éter etílico. s: DMSO, DMF, THF, MeOH; ls: CH₃CN; i: H₂O, 2-PropOH, CH₂Cl₂. AE para NaC₂₂H₁₇N₄O₄S (PM: 456.45): Experimental (Calculado): C, 57.48 (57.89); H, 4.81 (3.75); N, 11.60 (12.27); S, 6.062 (7.02) %. El rendimiento de la reacción fue del 56.49 %. PF > 350 °C (desc.).



ESPECTROSCOPÍA RMN

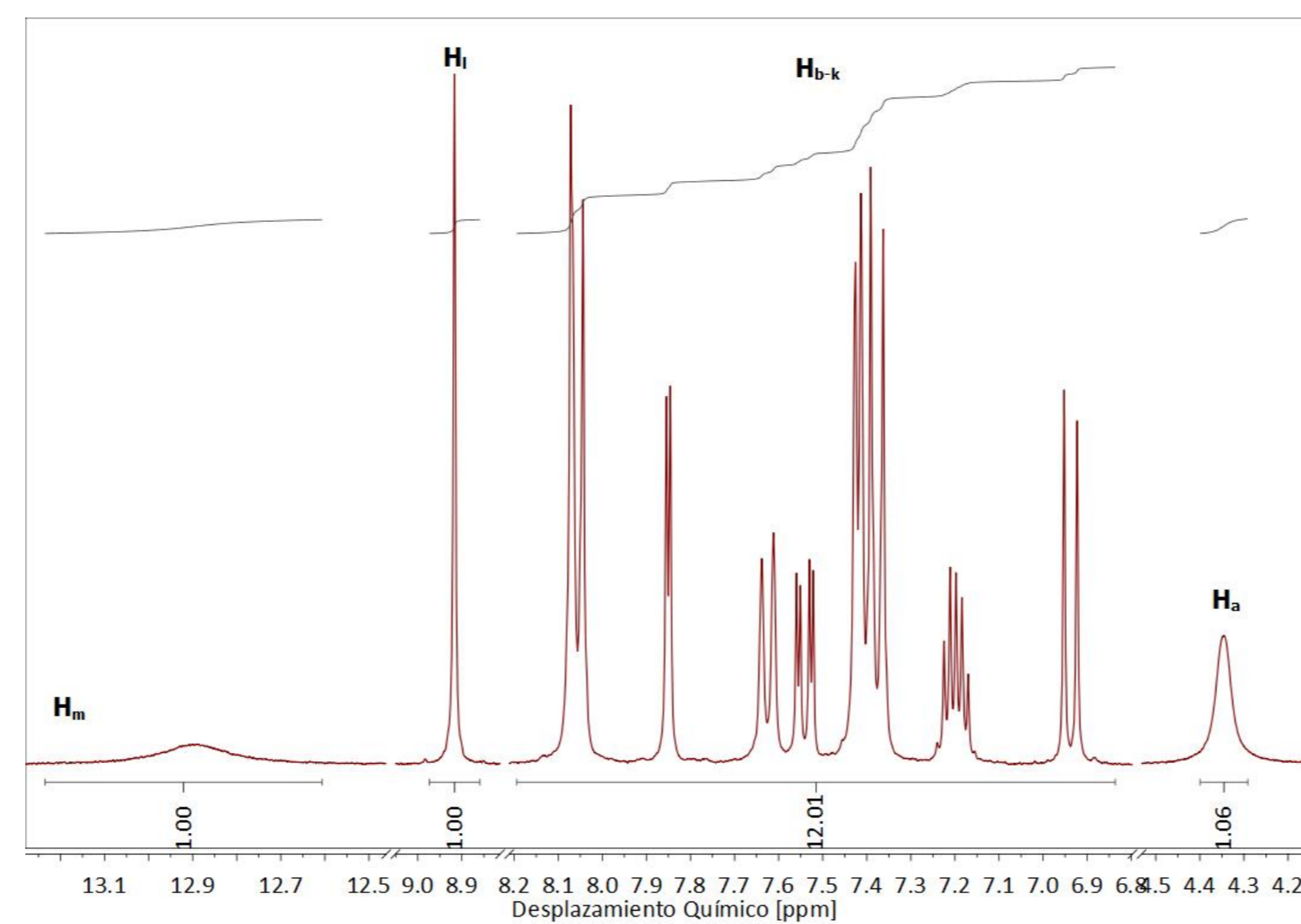


Figura 2. Espectro ¹H-RMN del compuesto.

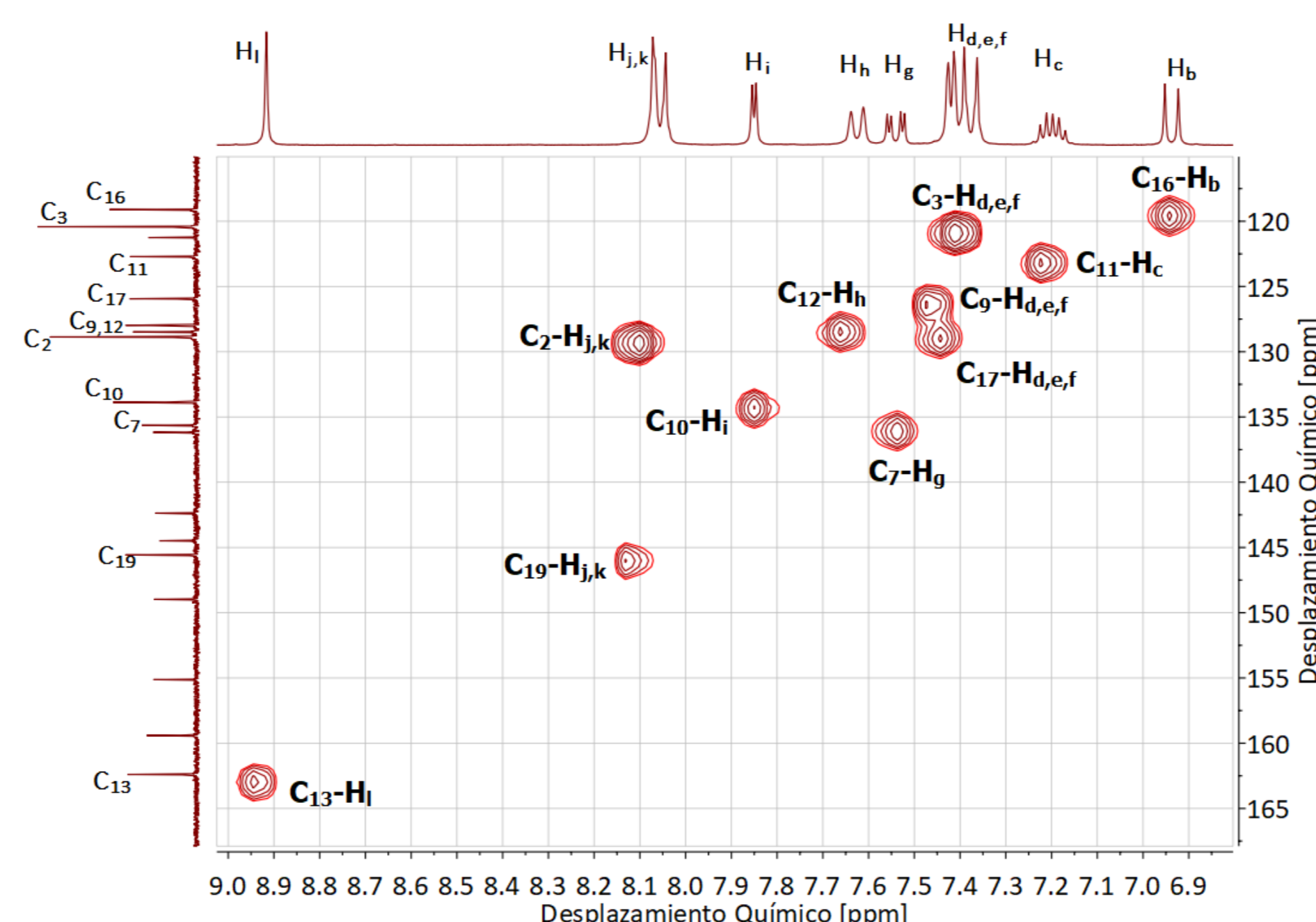


Figura 3. Espectro bidimensional HSQC del compuesto.

A partir de lo observado en los espectros RMN (¹H, ¹³C y HSQC), se propone la siguiente estructura para el compuesto obtenido.

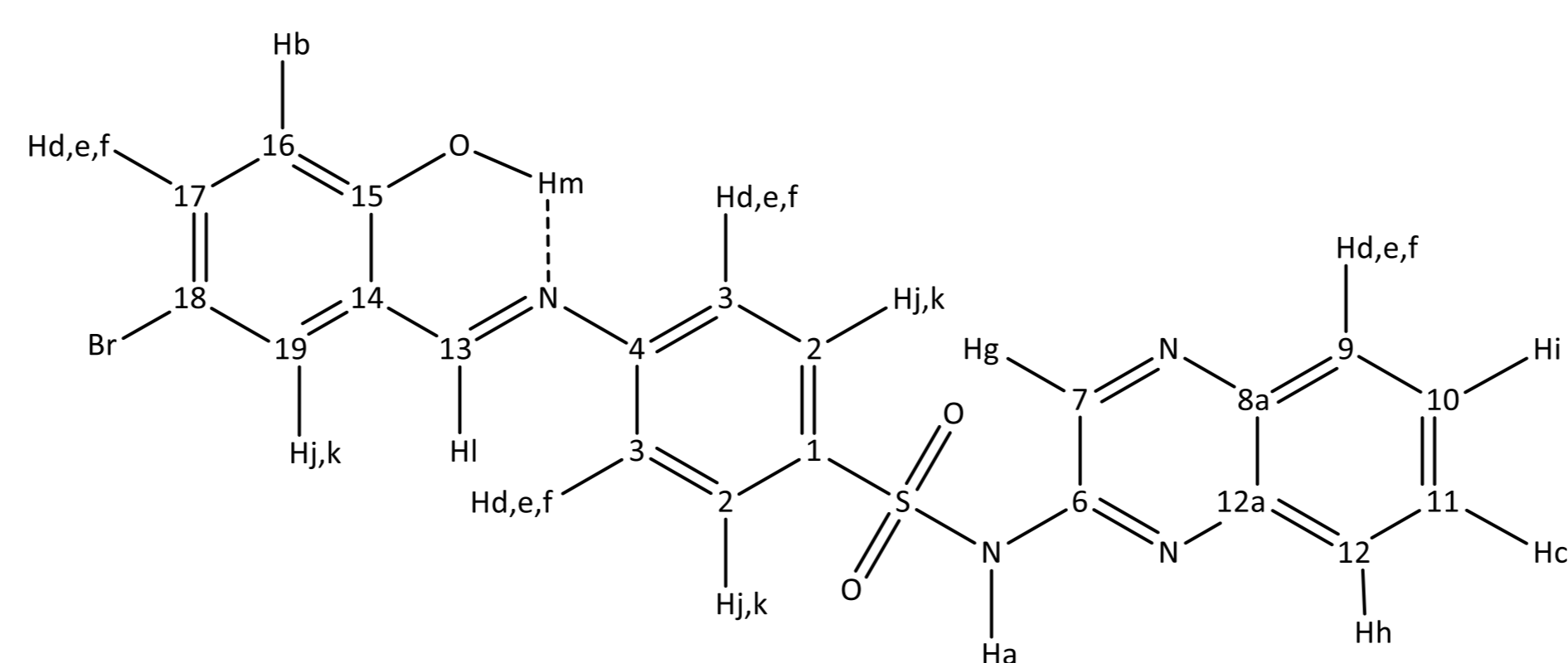


Figura 4. Estructura propuesta a partir de la información obtenida por RMN.



ESPECTROSCOPÍA UV-Vis

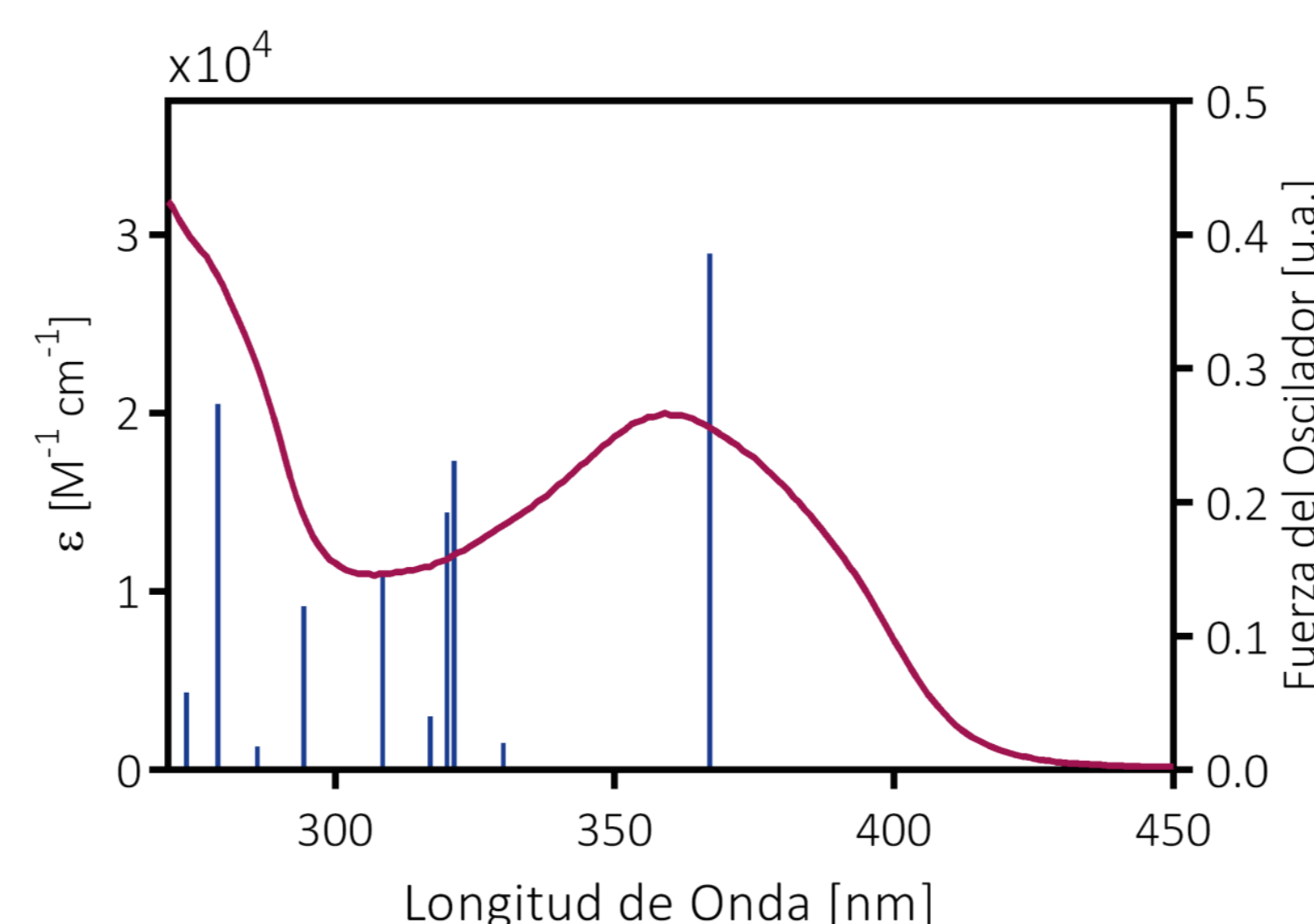


Figura 5. Espectro UV-Vis del compuesto en solución en DMSO. Las barras verticales representan las transiciones calculadas (DFT - B3LYP/6-311++G(d,2p)).



ESPECTROSCOPÍA FTIR

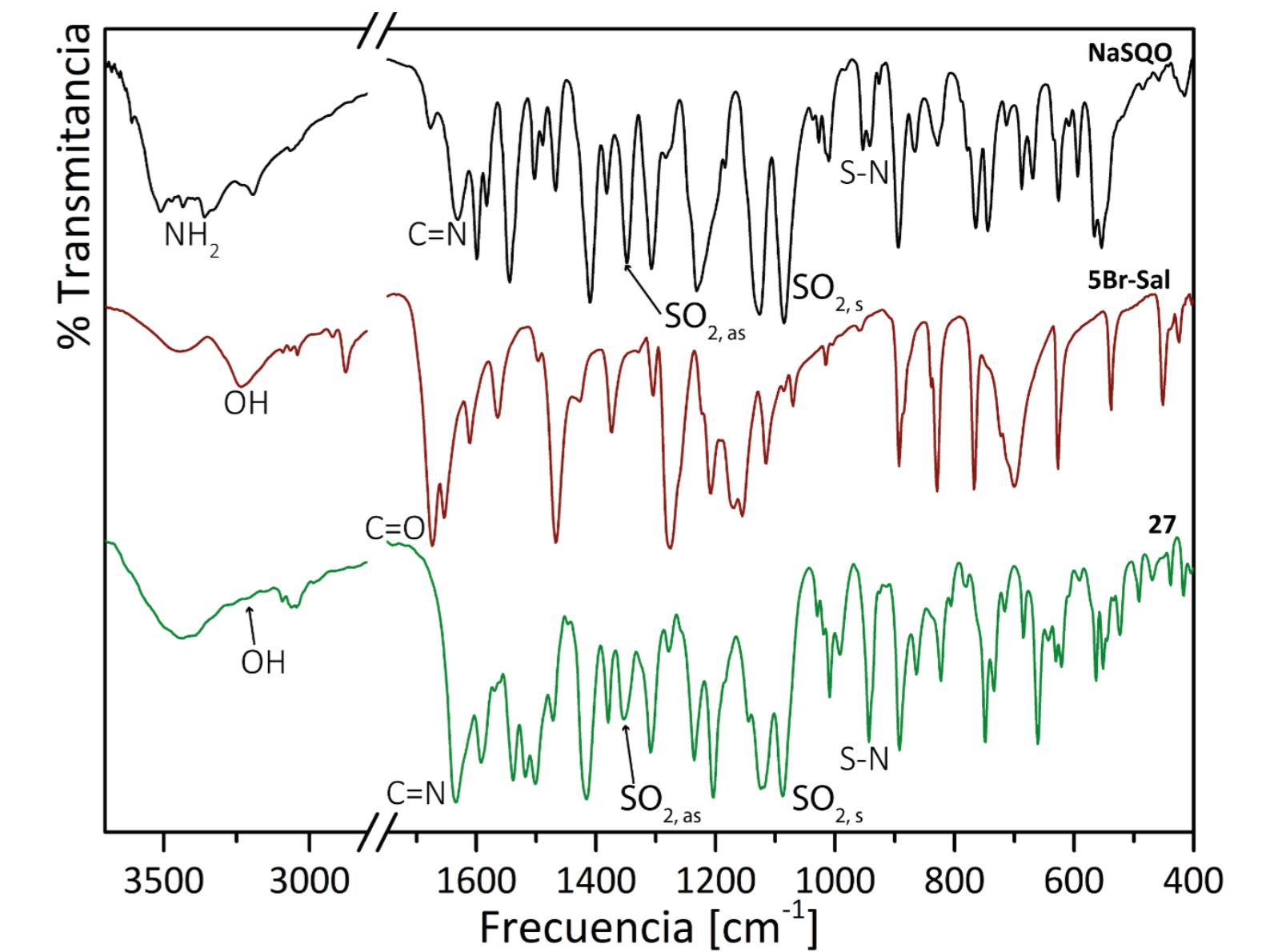


Figura 6. Espectro FTIR del compuesto y sus precursores.



TERMOGRAVIMETRÍA

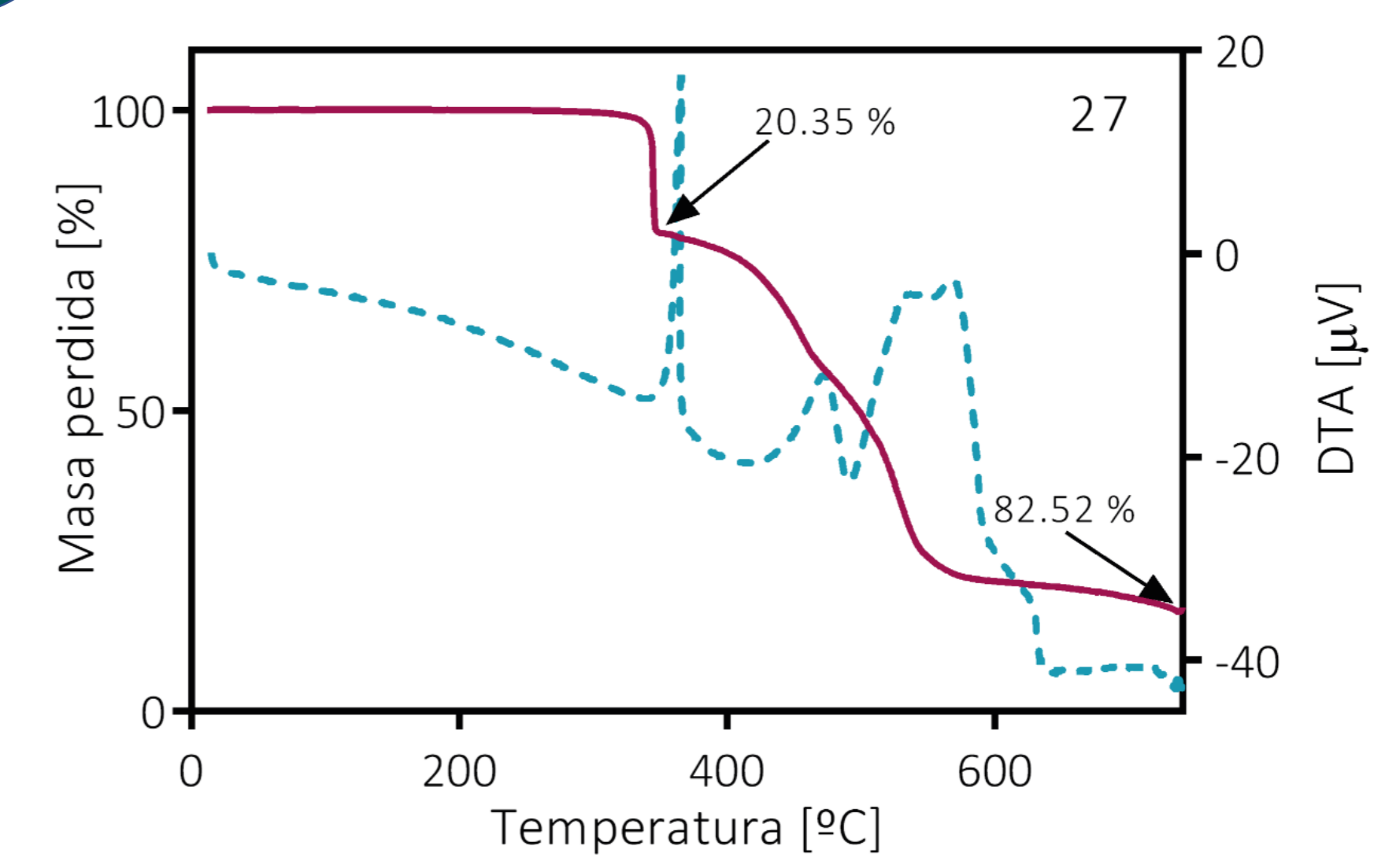


Figura 7. Curvas TG y DTA del compuesto medidas en atmósfera oxidante. El FTIR del residuo muestra la producción de Na₂SO₄.



CITOTOXICIDAD: A549

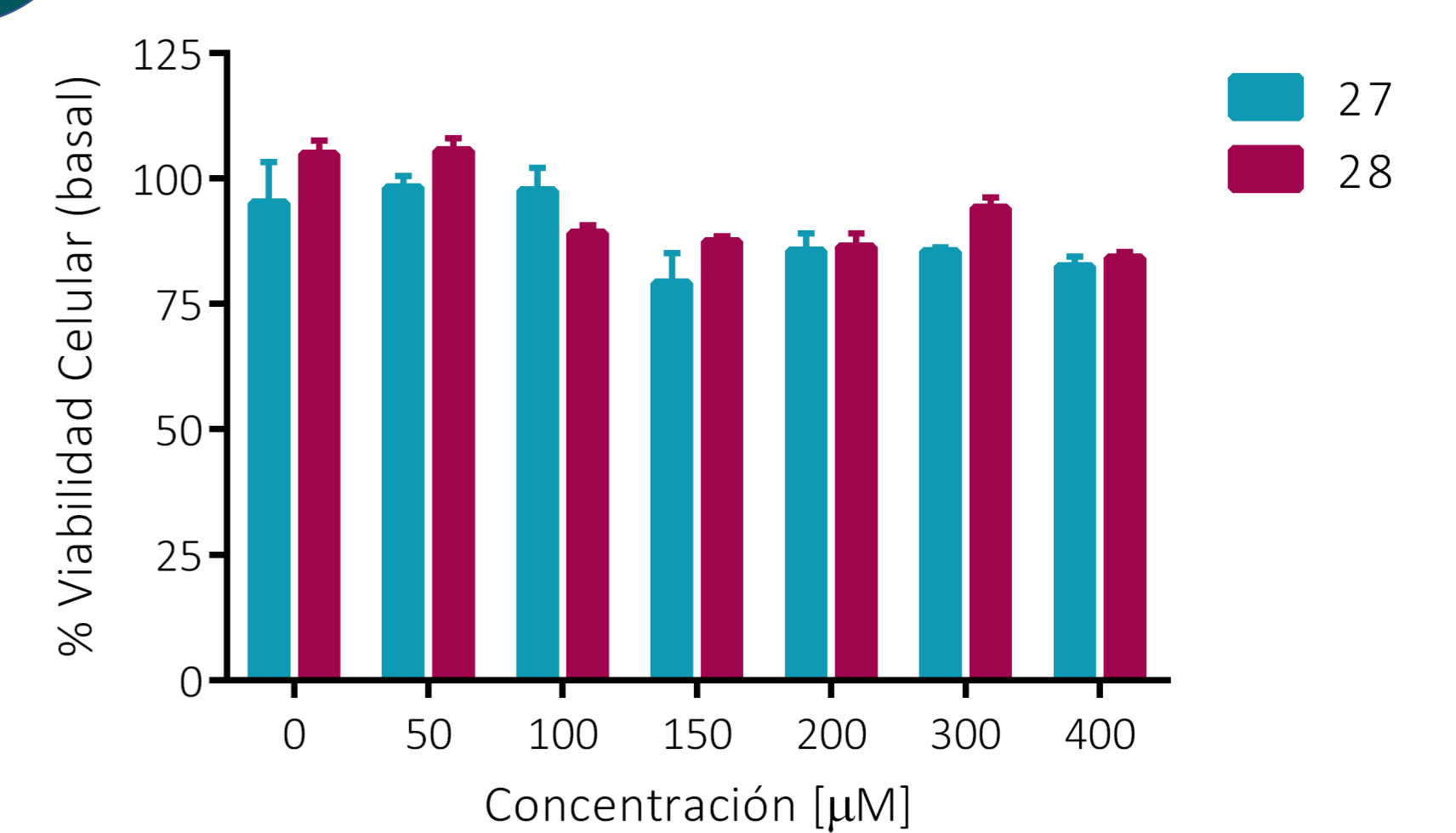


Figura 8. Viabilidad celular (línea tumoral A549) frente a diferentes concentraciones del compuesto y de su análogo con R1=O-CH₃.

CONCLUSIONES

- » Se sintetizó una base de Schiff con múltiples sitios de coordinación.
- » Se propuso su posible estructura molecular a partir del estudio de sus espectros de RMN protónico y de carbono-13, así como del bidimensional HSQC. Se propone la presencia de un puente de hidrógeno intramolecular y la configuración E del enlace imino.
- » Las espectroscopías UV-Vis, FTIR y técnicas termogravimétricas (TG y DTA) respaldan la estructura propuesta.
- » No se evidencia un buen perfil citotóxico frente a la línea tumoral A549, por lo que no parece ser un buen candidato terapéutico.



REFERENCIAS

1. A. Prakash, D. Adhikari, Int. J. ChemTech Res. **2011**, 3, 1891–1896.
2. L. Xia, Y. F. Xia, L. R. Huang, X. Xiao, H. Y. Lou, T. J. Liu, W. D. Pan, H. Luo, Eur. J. Med. Chem. **2015**, 97, 83–93.

