



## Síntese, caracterização de compostos de coordenação de zinco(II) contendo o fármaco sulfadiazina, de relevância no tratamento da toxoplasma

*Jennifer do Nascimento Chaves, Christiane Fernandes Horn, Adolfo Horn Jr., Adailton J. Bortoluzzi*

A toxoplasmose é considerada uma zoonose cosmopolita, afetando cerca de 2 bilhões de pessoas mundialmente. O tratamento se baseia na combinação de dois fármacos, a sulfadiazina (SDZ) e a pirimetamina. Apesar de ser a única forma de tratamento, esta combinação apresenta vários efeitos colaterais, como hipersensibilidade, reações alérgicas, mielosupressão e o desenvolvimento de resistência. Neste trabalho, apresentamos a síntese e caracterização físico-química de dois compostos de coordenação de zinco(II):  $[Zn(HL1)Cl_2]$  **1** e  $[Zn(HL1)(Cl)(SDZ)] \cdot 2H_2O$  **2**. Os compostos foram caracterizados por espectroscopia na região do infravermelho, ESI(+)-MS e ESI(+)-MS/MS, ponto de fusão, análise elementar (C,H,N). O composto **2**, adicionalmente, foi caracterizado por difração de raios X de monocristal, revelando a obtenção de um composto mononuclear de zinco(II), no qual o ligante HL1 e uma molécula do fármaco sulfadiazina (SDZ), encontram-se coordenados ao centro de Zn(II), neste caso o fármaco SDZ está coordenado pelo átomo de nitrogênio do grupo piperazina. Dados de caracterização na região do infravermelho indicam que o composto **2** possui as bandas típicas do composto **1**, e adicionalmente, as bandas em  $3421$  e  $3342\text{ cm}^{-1}$ , atribuídas ao grupo  $NH_2$ , e em  $1126\text{ cm}^{-1}$ , atribuído ao grupo  $SO_2$ , ambos presentes na estrutura do fármaco SDZ. Dados de análise elementar indicam as seguintes propostas, respectivamente para o composto **1** e para o composto **2**:  $C_8H_{12}Cl_2N_2OZn$  C= 33,31 (33,57), H= 4,19 (3,98), N= 9,71 (10,01) e  $C_{18}H_{25}ClN_6O_5SZn$ , C= 40,16 (40,45), H= 4,68 (4,43), N= 15,61 (15,32), onde os valores experimentais estão entre parênteses. O espectro de ESI(+)-MS para o composto **1** apresenta sinais de  $m/z$  153, 215, 403, 503 e 541, os quais são atribuídos aos cátions:  $[H_2L_1]^+$ ,  $[Zn(HL_1)]^+$ ,  $[Zn(H_2L_1)2Cl]^+$ ,  $[(HL_1)(Cl)Zn-(\mu-Cl)-Zn(L_1)]^+$  e  $[(HL_1)(Cl)Zn-(\mu-Cl)-Zn(HL_1)(Cl)]^+$ . O espectro de ESI(+)-MS para o composto **2** apresenta seis espécies catiônicas de  $m/z$  153, 233, 251, 367, 465 e 719. O sinal de  $m/z$  465 corresponde ao cátion  $[Zn(HL_1)(SDZ)]^+$  e o sinal de  $m/z$  719 corresponde ao cátion  $[Zn(HL_1)(SDZ)-(\mu-Cl)-Zn(HL_1)]^+$ . Conclui-se, com base nos resultados obtidos, que a reação entre o composto **1** e o fármaco SDZ foi eficiente, resultando em um composto inédito de Zn(II).

Palavras-chave: Compostos de coordenação de zinco(II), toxoplasmose, difração de raios X.

Instituição de fomento: CNPq, FAPERJ.