

Síntese e caracterização por espectroscopia na região do Infravermelho do ligante tiossemicarbazona derivado da cânfora e seu complexo de zinco(II)

Autore(s): NOGUEIRA, Vanessa Senna (PG), CONSTANTINO, Ana Luiza Alves (IC), CORREA, Jessica Nunes (IC), GERVINI, Vanessa Carratu (PQ).

**Orientador: BRESOLIN, Leandro (PQ)
vanessa.nogueira460@gmail.com**

**Evento: Encontro de Pós-Graduação
Área do conhecimento: Química Inorgânica**

Palavras-chave: cânfora; Infravermelho; tiossemicarbazona.

1 INTRODUÇÃO

As tiossemicarbazonas são uma importante classe de ligantes doadores de pares de elétrons devido a presença de átomos de nitrogênio na forma de uma base de Schiff e de enxofre na forma de tiocarbonila. Sendo particularmente úteis para complexação de metais de transição¹. Tiossemicarbazona e seus derivados exibem uma grande variedade de propriedades biológicas, tais como antitumoral, antifúngica, antibacteriana, e antiviral².

O objetivo deste trabalho é preparar um ligante tiossemicarbazona derivado da cânfora e estudar sua capacidade quelante frente a metais de transição como zinco(II).

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Tiossemicarbazonas e semicarbazonas apresentam um amplo perfil farmacológico e constituem uma importante classe de compostos cujas propriedades têm sido extensivamente estudadas na Química Medicinal e, particularmente, na Química Medicinal Inorgânica, em razão de sua capacidade quelante e do papel da coordenação no seu mecanismo bioquímico de ação³. É possível diversificar a composição e a geometria da esfera de coordenação. Uma mudança na composição do aldeído ou cetona fragmento ligando tiossemicarbazida afeta substancialmente as propriedades biológicas dos compostos de coordenação de metais de transição⁴.

3 MATERIAIS E MÉTODOS (ou PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)

O pré-ligante foi preparado através, de uma reação tradicional de tiossemicarbazidas, em refluxo em meio etanólico tendo como catalisador gotas de HCl concentrado. Utilizou-se uma relação estequiométrica 1:1 da canforoquinona e da 4-feniltiossemicarbazida. Obteve-se um óleo de coloração alaranjada que solidificou depois de 2 dias. O presente ligante tem ponto de fusão de 203°-205°C. A síntese do complexo de zinco(II), se deu mediante uma reação de estequiometria 2:1, entre o pré-ligante canforoquinona-4-feniltiossemicarbazona, previamente desprotonado com uma solução KOH (1%), e o acetato de zinco(II) utilizando etanol como solvente, sob agitação por 3h. Foram obtidos cristais do ligante e do complexo

de zinco(II) em etanol, após evaporação dos solventes. O complexo de zinco(II) apresenta ponto de fusão superior a 300^o C.

4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

O pré-ligante (Z)-4-fenil-1-(4,7,7-trimetil-3-oxobicyclo[2,2,1]heptan-2-diona)tiossemicarbazona foi caracterizado por espectroscopia na região do infravermelho onde as principais bandas obtidas para o ligante são: $\nu_{C=N}$ 1593 cm^{-1} , $\nu_{C=O}$ 1708 cm^{-1} , $\nu_{C=S}$ 1012 cm^{-1} , ν_{N-H} 3331 cm^{-1} , ν_{N-H} 3278 cm^{-1} . As principais bandas obtidas para o complexo de zinco(II) são: $\nu_{C=N}$ 1591 cm^{-1} , $\nu_{C=O}$ 1728 cm^{-1} , $\nu_{C=S}$ 1012 cm^{-1} , ν_{N-H} ausência, ν_{N-H} 3304 cm^{-1} .

Com estas modificações nas bandas de absorção percebe-se que o pré-ligante atua de maneira bidentada, coordenando-se ao centro metálico através de átomos doadores N e S. Pode ser atribuída uma possível geometria tetraédrica ao complexo. A ausência da banda -NH no complexo indica a desprotonação do ligante antes da complexação.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Através da análise espectroscópica do pré-ligante podemos sugerir que o mesmo atua como um quelante, coordenando-se ao íon zinco(II) de forma bidentada, através dos átomos de N e S, tendo uma provável geometria tetraédrica. A ausência da banda -NH no espectro do complexo caracteriza a desprotonação do ligante antes da complexação do íon Zn (II).

Também se obteve monocristais do ligante e do complexo de zinco(II) foram encaminhados a análise de difração de raios X em monocristal na Universidade Federal de Santa Maria(UFSM).

REFERÊNCIAS

¹ABOU-MELHA, K. S.; FARUK, H. Bimetallic complexes of schiff base bis-[4-hydroxycuomarin-3-yl]-1N,5N-thiocarbohydrazone as a potentially dibasic pentadentate ligand. Synthesis, spectral, and antimicrobial properties. **Journal of the Iranian Chemical Society**, V. 5, N^o. 1, p. 122–134, 2008.

²HERNÁNDEZA, W. et al. Synthesis, Characterization, and In Vitro Cytotoxic Activities of Benzaldehyde Thiosemicarbazone Derivatives and Their Palladium (II) and Platinum (II) Complexes against Various Human Tumor Cell Lines. **Bioinorganic Chemistry and Applications**. V. 2008, p. 1-9, 2008.

³BERALDO, H. Semicarbazonas e tiossemicarbazonas: o amplo perfil farmacológico e usos clínicos. **Química Nova**, V. 27, N^o. 3, p. 461-471, 2004.

⁴CHUMAKOV, Y. et al. Crystal structures of 3-phenylpropenal thiosemicarbazone and its nickel and zinc chelates. **Journal Russian of coordination chemistry**, V. 32, N^o. 1, p.16-23, 2006.