

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA DO LIGANTE 5-Cl-ISATINA-3-N(CH₃)TIOSEMICARBAZONA E DE SEU COMPLEXO DE COBRE(II).

Autores: SANTOS, Lucas Pacheco Borges dos; VELASQUE, Jecika Maciel
BITTENCOURT, Viviane Conceição Duarte de; GONÇALVES, Bruna Lisboa;
BRESOLIN, Leandro

Orientadora: GERVINI, Vanessa Carratu,
Lucas_pacheco1995@hotmail.com

Evento: Congresso de Iniciação Científica
Área do conhecimento: Química Inorgânica

Palavras-chave: Isatina monohalogenada, tiossemicarbazona, complexo.

1 INTRODUÇÃO

Um composto de coordenação pode ser definido como uma espécie formada por um ou mais átomos metálicos rodeados por moléculas orgânicas, arranjados de forma bem definida. Pela sua natureza química, estes compostos possuem diversas aplicações, como na área de materiais, catálise e destacadamente em Química medicinal¹.

Desta maneira, o presente trabalho objetiva apresentar a síntese e caracterização por espectroscopia na região do infravermelho do ligante 5-Cl-isatina-3-N(CH₃)tiossemicarbazona, bem como de seu complexo de cobre(II). Também, a partir da análise dos dados adquiridos, comprovar a síntese destes novos compostos e obter assim informações preliminares com respeito às estruturas dos mesmos.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

As isatinas são moléculas que apresentam grande versatilidade sintética, o que dá origem a um grande interesse por esses compostos, não só no que diz respeito às propriedades biológicas que vem sendo constantemente relatadas, uma vez que há a possibilidade de utilização desses compostos como matéria-prima para a obtenção de substâncias bioativas, mas também devido aos seus aspectos estruturais^{2,3}.

As tiossemicarbazonas apresentam uma versatilidade de obtenção, assim como sua vasta aplicação como intermediários de muitos grupos de moléculas importantes⁴. Além disso, 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 Inorgânica⁵.

3 PROCEDIMENTO METODOLÓGICO

A síntese do ligante 5-Cl-isatina-3-N(CH₃)tiossemicarbazona se deu mediante uma relação estequiométrica 1:1 de 5-Cl-isatina e N(CH₃)tiossemicarbazida. Primeiramente solubilizou-se a 5-Cl-isatina e N(CH₃)tiossemicarbazida em 40 mL de etanol e, em catálise ácida, esta suspensão foi posta sob refluxo por 4h. Ao término da agitação, e após resfriamento, filtrou-se sob vácuo a suspensão resultante e um sólido laranja cristalino foi isolado. Este sólido apresentou ponto de fusão com decomposição em 240°C e foi caracterizado por espectroscopia na região do

infravermelho.

Para a síntese do complexo de Cu(II), partiu-se de uma relação estequiométrica 2:1 do ligante 5-Cl-isatina-3-*N*(CH₃)tiossemicarbazona para o sal metálico Cu(CH₃COO)₂. Primeiramente o ligante foi solubilizado em 10 mL de tetrahidrofurano e desprotonado com uma solução 1 % de KOH. O sal metálico foi solubilizado em 5 mL de água destilada e, esta solução foi vertida sob a solução do ligante desprotonado. A suspensão foi posta sob agitação por 4 h. Ao término da agitação, filtrou-se a suspensão por gravidade e um sólido castanho escuro foi isolado. Este sólido foi caracterizado por espectroscopia na região do infravermelho. Ambos compostos obtidos foram submetidos a ensaios de cristalização.

4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

As principais bandas identificadas no espectro de infravermelho que permitiram a caracterização do ligante 5-Cl-isatina-3-*N*(CH₃)tiossemicarbazona foram: C=N 1670 cm⁻¹, C=O 1697 cm⁻¹, C=S 1041 cm⁻¹, N-H_{amina sec.e amida} 3267 cm⁻¹ e CH₃ 2785 cm⁻¹. Já as principais bandas no espectro de infravermelho para o complexo foram: C=N 1674 cm⁻¹, C=O 1699 cm⁻¹, C=S 1049 cm⁻¹, N-H_{amina sec.e amida} 3334 cm⁻¹.

A síntese do novo ligante foi confirmada pelo desaparecimento de uma das bandas referentes ao grupamento C=O, e o surgimento de uma banda intensa característica na região de 1670 cm⁻¹ referente ao estiramento da ligação C=N formada. A formação do novo complexo de Cu(II) foi confirmada pelos deslocamentos sofridos pela bandas que correspondem as ligações que envolvem os átomos doadores de elétrons da molécula ligante. Os deslocamentos apresentados pelas bandas que correspondem às ligações C=N e C=S, comparando o espectro do ligante livre com o espectro do complexo, podem indicar que o ligante tenha se coordenado ao centro metálico através dos átomos doadores de N e S. Assim considerando a relação estequiométrica da reação e as geometrias preferenciais para o Cu(II), pode-se sugerir uma geometria tetraédrica para o complexo formado.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Com os resultados preliminares obtidos pode-se considerar a síntese de um novo ligante derivado de tiossemicarbazona e também um novo complexo de Cu(II). Procuram-se as melhores condições para se obter monocristais dos compostos e então elucidar suas estruturas através da análise por difração de raios X. A soma destes resultados e do estudo estrutural permitirá a investigação aprofundada quanto as possíveis aplicações para os compostos.

6 REFERÊNCIAS

- [1] JONES, C. J., *Química dos elementos dos Blocos d e f*. Porto Alegre, Bookman, 2003.
- [2] da Silva, B. N. M., *et al. Quim. Nova*, Vol. 33, No. 10, 2279-2282, 2010
- [3] Rosas, M. S. L., *et al. Rev. Virtual Quim.*, Vol 5, No. 2, 243-265, 2013
- [4] Tenório, R. P., *et al. Quim. Nova*, Vol. 28 No. 6, p.3646-3652, 2008.
- [5] Beraldo, H. *Quim Nova*, Vol. 27 No. 3, p.461-471, 2004