

**(E)-2-(2-OXOACENAPHTHYLEN-1-(2H)-YLIDENE)-N-
PHENYLHYDRAZINECARBOTHIOAMIDE E SEU COMPLEXO DE CD(II):
SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA**

**OLIVEIRA, Gabriela Porto; REZENDE, Douglas Fernandes, GERVINI, Vanessa Carratu.
BRESOLIN, Leandro.
Gabrielaporto38@gmail.com**

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

Palavras-chave: tiossemicarbazonas; complexo; metal.

1. INTRODUÇÃO

Compostos de coordenação ou complexos se baseiam na combinação entre um ácido de Lewis, espécie receptora de elétrons (metal), e a base de Lewis, espécie doadora de elétrons (ligante).^[1]

Além da importância biológica dos metais nos seres vivos, vários estudos relatam que os metais essenciais e não essenciais vêm sendo aplicados na Medicina, há muito tempo atrás até os dias atuais, para fins farmacológicos. Portanto a área de Química Inorgânica Medicinal apresenta um grande potencial no desenvolvimento de diagnósticos e de novos agentes terapêuticos.^[2] Sendo que em alguns casos o complexo é mais ativo que o ligante livre ou o complexo pode ativar o ligante como agente citotóxico, o que pode promover a diminuição da resistência celular à droga.^[3] Por isso é interessante estudar tanto o ligante livre quanto complexado, pois ambos podem apresentar atividade biológica, como por exemplo, a diminuição dos efeitos colaterais e também podendo atuar como agente sequestrante no caso de contaminações com metais pesados como o mercúrio.

O presente trabalho tem como finalidade apresentar a síntese do ligante (E)-2-(2-oxoacenaphthylen-1-(2H)-ylidene)-N-phenylhydrazinecarbothioamide e de seu complexo de Cd(II). Além disso, realizar a caracterização espectroscópica na região do Infravermelho (IV) de ambos, assim permitindo confirmar a formação do complexo e sugerir uma geometria.

2. REFERENCIAL TEÓRICO

Os compostos derivados de tiossemicarbazonas são amplamente encontrados na literatura devido ao seu potencial quelante e as suas propriedades químicas, biológicas e farmacológicas como atividade antitumoral, citotóxica, antibacteriana, antiviral e dentre outras. A obtenção de tiossemicarbazonas consiste na reação entre um aldeído ou cetona e uma tiossemicarbazida, apresentando um baixo custo de síntese e economia de átomos. Pois durante o processo de síntese somente a água é liberada e os átomos presentes nos reagentes são convertidos em produtos, o que explica altos rendimentos.^[4] Além disso, alguns estudos demonstraram que essa classe de compostos pode ser usada na identificação quantitativa de metais na área de química analítica.

3. MATERIAIS E MÉTODOS (PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)

A síntese do ligante (E)-2-(2-oxoacenaftileno-1-(2H)-ylidene)-N-phenylhydrazinecarbothioamide ocorreu por meio da reação entre quantidades equimolares de acenaftileno-1,2-diona e de 4-Feniltiosemicarbazida (1:1), foi pesado 1g e 0,9g respectivamente e o meio foi acidificado por ácido acético glacial. O sistema foi submetido a refluxo por 6 horas e após a filtração a vácuo obteve-se um precipitado de coloração marrom.

A síntese do complexo de Cd(II) com o ligante estudado ocorreu numa reação 1:2, onde o ligante foi solubilizado com THF, previamente desprotonado com uma solução de Hidróxido de potássio, e reagiu com o sal acetato de cádmio. O sistema foi submetido a agitação por 3 h e obteve-se um precipitado vermelho alaranjado por filtração simples.

A análise por espectroscopia na região do infravermelho (IV) do ligante e do complexo foi realizada em um espectrômetro Shimadzu-IR PRESTIGE-21, no estado sólido, por refletância difusa, com leitura na região de 4000 a 400 cm^{-1} .

4. RESULTADOS e DISCUSSÃO

O ligante apresentou ponto de fusão de 189-193 $^{\circ}\text{C}$ e rendimento de 92,2%, enquanto que o complexo apresentou ponto de fusão com decomposição em 287-290 $^{\circ}\text{C}$, essa diferença sugere a formação do composto de coordenação.

As principais bandas obtidas no Infravermelho que caracterizam a formação do ligante com as suas respectivas intensidades são: N-H_(F) 3296.35 cm^{-1} , C=N_(F) 1595.13 cm^{-1} , C=S_(m) 1165.00 cm^{-1} , C=O_(F) 1691.57 cm^{-1} , N-N_(m) 1051.20 cm^{-1} , C-H_(m) (anel) 3057.17 cm^{-1} . Já as bandas que caracterizam a obtenção do complexo com as suas intensidades relativas são: ausência de N-H, C=N_(m) 1581.63 cm^{-1} , C=S_(m) 1174.65 cm^{-1} , C=O_(m) 1674.21 cm^{-1} , N-N_(m) 1051.20 cm^{-1} , C-H_(F) (anel) 2974.23 cm^{-1} . Assim, as abreviaturas usadas para as intensidades das bandas correspondem a (F) = forte e (m) = médio.

O desaparecimento da banda de ligação N-H indica que ocorreu a desprotonação do ligante como o esperado. Assim, considerando os deslocamentos nos números de onda ao comparar ligante e complexo pode-se prever que o ligante se coordena ao metal via N,S-doador formando anéis de cinco membros que são estáveis.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Por meio dos dados obtidos no Infravermelho sugere-se que o complexo apresenta geometria tetraédrica, onde o ligante coordenou-se ao metal através dos átomos doadores N e S. Portanto, o ligante é classificado como quelante bidentado aniônico NS doador, onde o efeito quelato estabiliza o complexo formado. Porém, somente a análise de Difração de raios-X em monocristal fornecerá uma geometria exata.

6. REFERENCIAS

[1] SHRIVER, D.F. e ATKINS, P.W. **Química Inorgânica**. Trad. Roberto de Barros Faria. 4^a ed. Porto Alegre: Bookman, 848 p., 2008.

[2] PARRILHA, Gabrieli Lessa. **Tese de Doutorado**, UFMG, Belo Horizonte – MG, 2012.

[3] SILVA, Thays S. **Tiossemicarbazonas e seus complexos metálicos com atividade farmacológica: estudos no estado sólido e testes de atividade**. Departamento de Química.

[4] TENÓRIO, R. P., et al. **Tiossemicarbazonas: métodos de obtenção, aplicações sintéticas e importância biológica**. Química Nova, Vol. 28, No. 6, 1030-1037, 2005.