

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

5-CLORO-ISATINA-3-TIOSSEMICARBAZONA E SEU COMPLEXO DE COBRE(II): SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA.

Autores: VELASQUES, Jecika Maciel; BITTENCOURT, Viviane Conceição Duarte de; ALMEIDA, Vitor Yohan Grosskopf; GONÇALVES, Bruna Lisboa; BRESOLIN, Leandro.
Orientadora: GERVINI, Vanessa Carratu.
jecikamaciel@furg.br

Evento: Congresso de Iniciação científica.
Área do conhecimento: Química Inorgânica.

Palavras-chave: complexo; isatinas halogenadas; tiossemicabazona.

1 INTRODUÇÃO

Um composto de coordenação é definido como um ou mais átomos ou íons metálicos rodeados por moléculas orgânicas (ligantes) que possuem átomos com elétrons disponíveis para a interação com o metal^[1-2]. A Química dos compostos de coordenação possui notável importância dentro da Química inorgânica, uma vez que apresentam ampla possibilidade de aplicação como na área de catálise, materiais e em especial na Química inorgânica medicinal em função do potencial biológico que muitos destes compostos podem apresentar^[2].

Neste contexto, o presente trabalho objetiva apresentar a síntese do ligante 5-Cloro-Isatina-3-tiossemicarbazona^[3] e de seu complexo de cobre(II). Também comprovar a efetividade da síntese destes compostos por espectroscopia na região do infravermelho (IV). A análise espectroscópica destes compostos permite estudar e sugerir suas possíveis estruturas, através da demonstração de quais átomos do ligante estariam envolvidos na coordenação com o átomo metálico central. E assim, é possível propor a geometria do complexo formado.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Os ligantes tiossemicarbazonas e seus complexos metálicos têm sido extensivamente divulgados na literatura por conta do potencial químico e biológico que estas substâncias podem apresentar, dentre eles atuando como antitumoral, antibacteriano, antiviral e atividade citotóxica^[4]. Quimicamente, as tiossemicarbazonas são versáteis, sendo a síntese de seus derivados de baixo custo, simples, sem formação de intermediários, desta forma apresentando altos rendimentos^[2,4].

As isatinas substituídas destacam-se pela diversidade de propriedades farmacológicas. Em especial os compostos isatinas-3-tiossemicarbazonas, com substituição na posição 5 do anel da isatina, tem sido sintetizados e apresentados na literatura por potencializarem e ainda aumentarem atividades biológicas associadas a isatina como, antiviral, anticâncer, anti-inflamatória, de inibição enzimática, dentre outras^[5].

3 PROCEDIMENTO METODOLÓGICO

Para a síntese do ligante 5-Cl-Isatina-3-tiossemicarbazona foram pesadas

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

quantidades equimolares de 5-Cl-Isatina e tiossemicarbazida, os quais foram solubilizados em 40 mL de etanol e adicionados 10 gotas de $\text{CH}_3\text{COOH}_{\text{glacial}}$. A suspensão resultante foi colocada sob agitação e refluxo por 4 h. Um precipitado laranja amarelado foi isolado por filtração a vácuo e lavado com água destilada gelada, este precipitado apresentou ponto de fusão com decomposição em 254-270°C. A síntese do complexo ocorreu por meio de uma reação 2:1 do ligante 5-Cl-Isatina-3-tiossemicarbazona e do sal metálico de Cu(II). O ligante foi solubilizado em 15 mL de tetraidrofurano e o cloreto de cobre(II) em 5 mL de piridina. A solução do sal metálico foi adicionada sobre solução do ligante previamente desprotonado com Na^0 . A solução foi posta em agitação por 4 h. Foi isolado por rota evaporação um precipitado castanho cristalino, com ponto de fusão superior a 300°C.

Os precipitados de ligante e complexo foram submetidos a análise por espectroscopia na região do infravermelho (IV), num 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

As principais bandas encontradas no espectro de infravermelho que caracterizaram a formação do ligante foram $\nu\text{C}=\text{N}$ 1687 cm^{-1} , $\nu\text{C}=\text{O}$ 1759 cm^{-1} , $\nu\text{C}=\text{S}$ 1049 cm^{-1} , $\nu\text{N-H}_{\text{amina sec.}}$ 3414 cm^{-1} , $\nu\text{N-H}_{\text{amida}}$ 3265 cm^{-1} e $\nu\text{NH}_{\text{amina prim.}}$ 3167 cm^{-1} . Da mesma forma, as bandas que caracterizaram o complexo de Cu(II) foram $\nu\text{C}=\text{N}$ 1699 cm^{-1} , $\nu\text{C}=\text{S}$ 1056 cm^{-1} , $\nu\text{N-H}_{\text{amina sec.}}$ 3273 cm^{-1} , $\nu\text{N-H}_{\text{amida}}$ 3265 cm^{-1} e $\nu\text{NH}_{\text{amina prim.}}$ 3155 cm^{-1} .

A banda na região de 1687 cm^{-1} característica da ligação C=N comprova que a síntese do ligante 5-Cl-Isatina-3-tiossemicarbazona foi efetiva. O não desaparecimento da banda característica de ligação N-H pode indicar que não ocorreu a desprotonação prévia do ligante, conforme esperado. Tendo em vista os deslocamentos sofridos nos números de onda característicos das ligações C=N e C=S, bem como das condições de reação, pode-se supor que o ligante agiu de forma bidentada via N-S-doador, formando 2 anéis quelatos de 5 membros. Não se identificou banda característica ao $\nu\text{C}=\text{O}$ no espectro do complexo, o que pode ser justificado pela possível formação de ligações de hidrogênio na estrutura do complexo.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Pelos dados obtidos na análise de espectroscopia na região do IV, pode-se propor uma geometria quadrado planar para o complexo de Cu(II), onde o ligante atuou como quelato, coordenando-se de forma bidentada através dos átomos doadores de S e N.

Como perspectiva aguarda-se a instalação do equipamento de Difração de raios X em pó no CEME (FURG), que irá auxiliar nas caracterizações destes e dos demais ligantes e complexos que ainda estão em fase de síntese, a fim de corroborar para o estudo estrutural desses compostos.

REFERÊNCIAS

[1]SHRIVER, D. F.; ATKINS, W. P. **Química Inorgânica**. Porto Alegre, Bookman,

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

2003.

[2]BITTENCOURT, V. C. D. **Dissertação de mestrado**, FURG, Rio Grande, 2012.

[3]BITTENCOURT, V. C. D., et al. *Acta Cryst.* E70, o64–o65, 2014

[4]TENÓRIO, R. P. *et al.* **Química Nova**, vol. 28, No. 6, 1030-1037, 2005.

[5]PERVEZ, H. *et al.* **Molecules**, vol. 16, 6408-6421, 2011.