

# 13ª Mostra da Produção Universitária

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

## ESTRUTURA CRISTALINA/MOLECULAR DO LIGANTE 5-BROMOISATINA-4-FENILTIOSSMICARBAZONA

**Autores:** ZIEM, Susimara (IC); LEHMANN, Ueslei Zott (IC); RODRIGUES, Gustavo (IC); BANDEIRA, Katlen C.T. (PG); GERVINI, Vanessa C. (PQ); OLIVEIRA, Adriano B. de (PQ); NÄTHER, C.(PQ); JESS, I. (PQ)  
**Orientador:** BRESOLIN, Leandro  
[leandro\\_bresolin@yahoo.com.br](mailto:leandro_bresolin@yahoo.com.br)

**Evento:** Iniciação Científica  
**Área do conhecimento:** Química Inorgânica

**Palavras-chave:** feniltiossemicarbazida; estrutura cristalina; difração de raios-X

### 1 INTRODUÇÃO

Moléculas 3-tiossemicarbazonas têm sido extensivamente estudadas desde a descoberta de 1-metilisatina-3-tiossemicarbazona (Marboran<sup>TM</sup>) que foi ativo no tratamento da varíola e por apresentar uma ampla gama de atividades biológicas (LABISBAL,2000). As estruturas cristalinas e a caracterização de isatina-3-tiossemicarbazona e seus derivados, assim como os seus complexos metálicos, têm sido amplamente estudados (FONSECA, 2010). Diante disso, o presente trabalho tem como objetivo descrever a estrutura cristalina/molecular do ligante 5-bromoisatina-4-feniltiossemicarbazona.

### 2 REFERENCIAL TEÓRICO

As isatina-3-tiossemicarbazonas apresentam como átomos doadores N, O e S, podendo atuar de modo tridentado ao coordenar-se ao íon metálico. Estes ligantes se apresentam versáteis com ampla capacidade quelante, além da possibilidade de ocorrência de ligações de hidrogênio formando estruturas poliméricas. O estudo de cadeias supramoleculares é importante no contexto de suas aplicações como carreadores no transporte de drogas em sistemas biológicos, bem como na detecção de traços de metais (LOBANA, 2008).

### 3 MATERIAIS E MÉTODOS (ou PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)

O ligante foi sintetizado a partir de uma reação com relação molar 1:1 de 4-bromoisatina (8,83 mmol) e 4-feniltiossemicarbazida (8,83 mmol) em etanol (50 mL), catalisada com ácido clorídrico. A reação foi submetida a refluxo durante 6 h. Após este período o precipitado obtido foi lavado e seco à vácuo. Os monocristais aptos para difração de raios X foram obtidos em etanol pela evaporação lenta do solvente.

### 4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

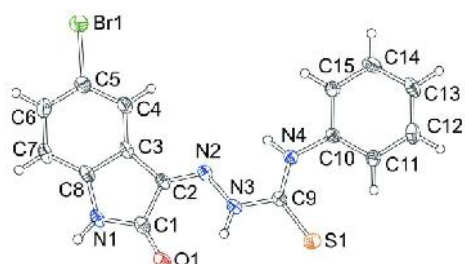
A estrutura cristalina/molecular do ligante apresenta conformação *E* para os átomos sobre a ligação N2—N3. Esta conformação está relacionada com as ligações de hidrogênio intramolecular N—H...N e N—H...O (Fig.1; Tabela 1). As

# 13ª Mostra da Produção Universitária

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

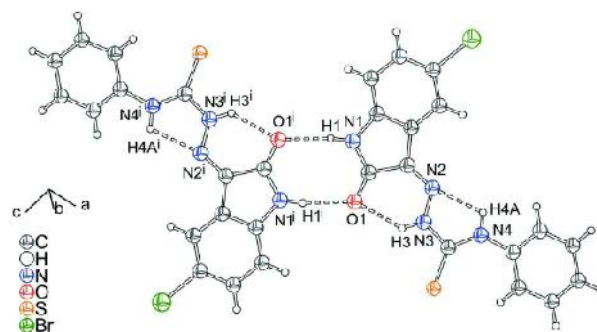
moléculas estão conectadas através de pares centrossimétricos de interações N—H...O (Fig.2). Adicionalmente são observadas interações  $\pi$ - $\pi$ , com distâncias C...C de 3.236 (8), 3.351 (4), 3.451 (5) e 3.471 (7) Å. As moléculas estão dispostas em camadas e são empilhados na direção cristalográfica *a*.

**Figura 1** – Estrutura cristalina/molecular do ligante 5-

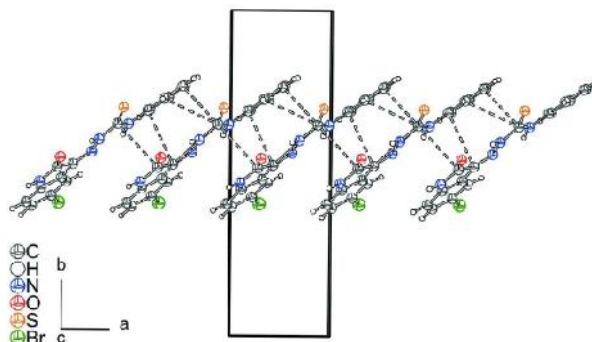


bromoisatina-4-feniltiossemicarbazida

**Figura 2** – Ligações de hidrogênio intra e intermolecular



**Figura 3** – Interações  $\pi$ - $\pi$  C...C



Fonte: Bandeira, K.C.T *et al.* Acta Cryst. E69, o1337-o1338, 2013.

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A análise de difração de raios-X em monocristal confirma a obtenção do ligante 5-bromoisatina-4-feniltiossemicarbazona. Para dar continuidade a esse trabalho pretende-se estudar a capacidade complexante desta molécula frente a íons Cu(II), Ni(II) e Pb(II).

## REFERÊNCIAS

- BANDEIRA, K.C.T.; BRESOLIN, L.; NÄTHER, C.; JESS, I.; OLIVEIRA, A. B. de. **Acta Cryst.** E69, o1337-O1338, 2013.
- FONSECA, A.S.; PERE, G. L.; STORINO, T. G.; BRESOLIN, L.; CARRATU, V. S **Química Nova.** V.33. No.7, 1453-1456, 2010.
- LABISBAL, E. et al. **Polyhedron.** V.19, 1255–1262, 2000.
- LOBANA, T.S.; KHANNA, S; SHARMA, R. et al. **Cryst. Growth. Des.** V.8. 1203, 2008.