

13ª Mostra da Produção Universitária

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

ESTRUTURA CRISTALINA/MOLECULAR DO LIGANTE 2-BENZOIL-4-COROANILINA TIOSSEMICARBAZONA

Autores: LEHMANN, Ueslei Zott (IC); ZIEM, Susimara (IC); RODRIGUES, Gustavo (IC); BANDEIRA, Katlen C.T. (PG); GERVINI, Vanessa C. (PQ); OLIVEIRA, Adriano B. de (PQ); ZAMBIAZI, P. J. (PG)
Orientador: BRESOLIN, Leandro
leandro_bresolin@yahoo.com.br

Evento: Iniciação Científica
Área do conhecimento: Química Inorgânica

Palavras-chave: tiossemicarbazona; estrutura cristalina; difração de raios-X

1 INTRODUÇÃO

Tiossemicarbazonas ($R^1R^2C^2=N^3-N^2(H)-C^1(=S)N^1R^3R^4$) constituem uma importante classe de ligantes quelantes N,S-doador. As tiossemicarbazonas são ligantes versáteis que podem atuar de forma neutra ou aniônica ao coordenar-se a um íon metálico¹. Além disso, grupos doadores adicionais podem ser facilmente incluídos nestes ligantes propiciando diferentes modos de coordenação. Diante disso, o presente trabalho tem como objetivo descrever a síntese e estrutura cristalina/molecular de um novo ligante tiossemicarbazona, denominado 2-benzoil-4-cloroanilina tiossemicarbazona.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

As tiossemicarbazonas apresentam uma vasta gama de potencialidades biológicas, como antimicrobiano², antitumoral³, antiviral⁴, antiprotozoária⁵. A ação inibitória destes compostos é atribuída a sua propriedade quelante⁶.

3 MATERIAIS E MÉTODOS (ou PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)

O ligante foi sintetizado a partir de uma reação com relação molar 1:1 de 4-cloro-2-benzoil-anilina (8,83 mmol) e tiossemicarbazida (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 a vácuo. Os monocristais aptos para difração de raios X foram obtidos em etanol pela evaporação lenta do solvente.

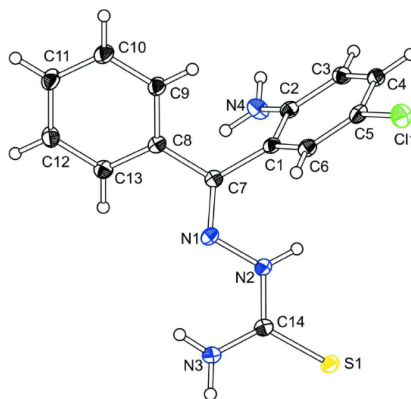
4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

A estrutura cristalina/molecular do ligante (Fig. 1) não é plana e o ângulo diedro entre os dois anéis aromáticos atinge 81,31 (13)°. O fragmento tiossemicarbazona é quase planar, com um ângulo de torção de 178.37 (12)° para os átomos N1/N2/C14/S1. Além disso, a molécula apresenta uma conformação *trans* para os átomos sobre a ligação N1-N2. O substituinte amina na posição *orto* pode ajudar na complexação de íons metálicos. Já o substituinte cloro na posição *para* contribui para o arranjo supramolecular da molécula.

13ª Mostra da Produção Universitária

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

Figura 1 – Estrutura cristalina/molecular do ligante 2-benzoil-4-cloroanilina tiossemicarbazona⁷.



Fonte: Bandeira, K.C.T *et al.* *Acta Cryst.* E70, o680, 2014

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A análise de difração de raios-X em monocristal confirma a obtenção do ligante. Pretende-se estudar a capacidade complexante desta molécula frente a íons Cu(II), Ni(II) e Pb(II).

REFERÊNCIAS

1. FONSECA, A.S.; PERE, G. L.; STORINO, T. G.; BRESOLIN, L.; CARRATU, V. S. **Química Nova.** V.33. No.7, 1453-1456, 2010.
2. BERALDO, H. **Quím. Nova.** V.27, 461-471, 2004.
3. BHARTI, N; HUSAIN, K; GARZA, M TG; et al. **Bioorg. Med. Chem. Lett.** V.12, 3475-3478, 2002.
4. TEITZ, Y; RONEN, D; VANSOVER, A; et al. **Antiviral Res.** V.24, 305-314, 1994.
5. FEUN, L; MODIANO, M; LEE, K; et al. **Cancer Chemother. Pharmacol.** V.50, 223-229, 2002.
6. LABISBAL, E. et al. **Polyhedron.** V.19, 1255–1262, 2000.
7. BANDEIRA, K.C.T.; BRESOLIN, L.; LEHMANN, U. Z.; ZAMBIAZI, P. J.; OLIVEIRA, A. B. de. **Acta Cryst.** E70, o680, 2014.