

## Síntese e caracterização estrutural do ligante isatina-3-oxima.

Bianca Barreto Martins<sup>1\*</sup> (PG), Anderson Almeida Dias<sup>1</sup> (IC), Vinícius F. Giglio<sup>2</sup> (PG), Adriano Bof de Oliveira<sup>3</sup> (PQ), Leandro Bresolin<sup>1</sup> (PQ), Vanessa Santana Carratu<sup>1</sup> (PQ).

\*biancabmartins@yahoo.com.br

1. Universidade Federal de Rio Grande/RS - FURG

2. Universidade Federal de Santa Maria/RS-UFSM

3. Universidade Federal de Sergipe /SE-UFSE

Palavras Chave: base de Schiff, isatina-3-oxima.

### Introdução

O ligante isatina-3-oxima pertence à classe das iminas ou bases de Schiff. Encontra-se na literatura um amplo estudo à cerca destes compostos e seus complexos devido as suas aplicações como substâncias biologicamente ativas como antidepressivos, antibióticos, antitumorais, antiinflamatórios, nematocidas e outros agentes medicinais<sup>1</sup>. Além de apresentarem aplicações nos estudos de cristais líquidos, corantes, luminóforos e polímeros<sup>2</sup>. Relatos recentes mostram que derivados de oximas, apesar de serem ligantes clássicos, exibem uma grande variedade de modos de coordenação e reatividade<sup>3</sup> realçando a importância das investigações a cerca de suas estruturas. Neste trabalho apresentamos a síntese do ligante isatina-3-oxima caracterizado por ponto de fusão, espectroscopia de infravermelho e difração de raios-X.

### Resultados e Discussão

A síntese do ligante isatina-3-oxima ocorre mediante a reação de isatina com hidroxilamina em etanol, numa proporção 1:1 em meio ácido sob refluxo durante seis horas. A solução mãe é neutralizada com NaHCO<sub>3</sub> 10% e resfriada. Desta mistura isolou-se cristais amarelos aptos à difração de raios X, ponto de fusão 234°C. As principais bandas observadas para o ligante na região do infravermelho são:  $\nu(\text{C}=\text{N})1664\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu(\text{N}-\text{O})1026\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu(\text{O}-\text{H})2908\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu(\text{C}=\text{O})1712\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu(\text{N}-\text{H})3178\text{cm}^{-1}$ . A análise por difração de raios X implica num composto de fórmula molecular C<sub>8</sub>H<sub>5</sub>N<sub>2</sub>NaO<sub>2</sub> (C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O sistema cristalino triclinico, grupo espacial P-1, Z=2, R<sub>1</sub>=0,0981 e wR<sub>2</sub>= 0,1350. A estrutura consiste de 3 unidades cristalograficamente independentes, sendo que duas estão protonadas (estado neutro) e uma desprotonada (forma aniônica) cujo contra-íon é o íon sódio (Na<sup>+</sup>). Optamos por representar apenas a unidade assimétrica desprotonada (figura 1), mas salientamos a ocorrência de várias unidades inclusive protonadas. Observa-se ainda a presença duas moléculas de água que completam a estrutura. A cela elementar representada na figura 2 mostra os ligantes desprotonados que aparecem no meio da

cela, paralelamente ao eixo cristalográfico c, onde também encontram-se os cátions Na<sup>+</sup>. Os ligantes protonados aparecem nas faces paralelas ao plano formado pelos eixos a e c. Há um centro de inversão no centro da cela elementar.

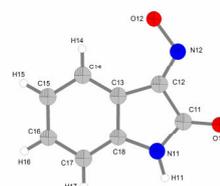


Figura 1: Representação da unidade assimétrica desprotonada do isatina-3-oxima. As elipsóides térmicas com probabilidade de 40%.

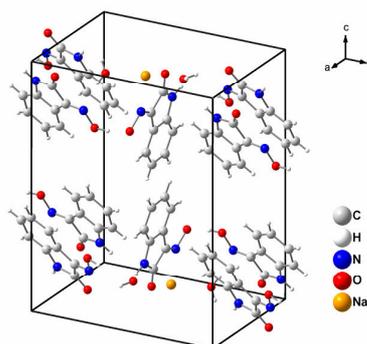


Figura 2: Cella Elementar do composto isatina-3-oxima

### Conclusões

O estudo estrutural de compostos derivados de oximas vem ampliar as possibilidades de investigação das propriedades, aplicações e da química de coordenação destas espécies, que aliado ao estudo das interações intermoleculares (aqui não discutidas) pode facilitar o entendimento dos mecanismos de ação biológica.

### Agradecimentos

FURG, UFSM, FAPERGS 07/0127-6, CAPES 125/08, Lab. de Catálise e Síntese Inorgânica – EQA – FURG, CNPq.

<sup>1</sup> Montazerzohori, M.; Joohari, S.; Musavi, S.A. *Spectrochimica Acta Part A* **2009**, 73, 231-237.

<sup>2</sup> Hudák, A.; Kosturiak, A. *Journal of thermal analysis and calorimetry* **1999**, 58, 579-587.

<sup>3</sup> Karapinar, E.; Karapinar, N.; Ozcan, E. *Russian Journal of Coordination Chemistry* **2006**, 32, 885-890.