

ESTRUTURA CRISTALINA/MOLECULAR DA 5-BROMOISATINA-3-TIOSSEMICARBAZONA

Fernanda Rosi S. Pederzoli¹ (PG)*, Katlen C.T. Bandeira¹ (PG), Jean Lucas de O. Arias¹ (IC), Leandro Bresolin¹ (PQ), Adriano B. de Oliveira² (PQ), Vanessa S. Carratu¹ (PQ), Aline Locateli³ (PQ)

fequimica2005@yahoo.com.br

(1) Escola de Química e Alimentos, (FURG), Rio Grande-RS

(2) Departamento de Química, (UFS), São Cristóvão-SE

(3) Departamento de Química, (UFMS), Santa Maria-RS

Palavras Chave: Ligantes tiossemicarbazona

Introdução

As tiossemicarbazonas vêm despertando grande interesse na atualidade devido ao fato que esta classe de moléculas apresenta amplo perfil farmacológico, podendo ser utilizadas como intermediárias na síntese orgânica e também pela capacidade de complexar metais do bloco p e d.

O amplo perfil farmacológico das tiossemicarbazonas é atribuído ao fato destas apresentarem afinidade pela enzima DNA ribonucleotídeo redutase [1]. Além disso, a tiossemicarbazona derivada da isatina, a 1-metilisatina-3-tiossemicarbazona, apresenta atividade biológica contra o vírus da varíola [2].

O objetivo deste trabalho é apresentar a estrutura cristalina/molecular do ligante 5-bromoisatina-3-tiossemicarbazona obtida por difração de raios-X de monocristal.

Resultados e Discussão

A 5-bromoisatina-3-tiossemicarbazona foi sintetizada utilizando-se uma razão molar 1:1 de 5-bromoisatina e tiossemicarbazida dissolvidos em etanol. A reação foi catalisada com HCl concentrado. O composto apresentou ponto de fusão entre 273-275°C e rendimento de 81%. Os cristais foram obtidos em acetonitrila em apresentam coloração laranja.

A estrutura cristalina/ molecular da 5-bromoisatina-3-tiossemicarbazona apresenta uma molécula de acetonitrila como solvato de cristalização e está representada na Figura 1. A molécula em questão cristaliza no sistema monoclinico e grupo espacial C_2/c . A célula elementar apresenta as constantes $a=20,017(4)\text{Å}$, $b=13,352(2)\text{Å}$ e $c=13,190(5)\text{Å}$ e ângulos α e γ igual a 90° e β igual a $129,258(2)^\circ$, sendo $Z=8$. O índice de discordância para $I>2\sigma(I)$ é igual a $R_1=0,0392$ e $wR_2=0,1036$ e para todos dados $R_1=0,0522$ e $wR_2=0,1036$.

O ângulo diedro entre o fragmento 5-bromoisatina e o fragmento tiossemicarbazona é de $1,803(8)^\circ$, confirmando a hibridização sp^2 dos átomos C(7), N(2), N(3) e C(9) e a planaridade esperada para esta espécie química. Os ângulos entre as ligações C(7)-N(2)-N(3) $117,8(3)^\circ$. N(2)-N(3)-C(9) $119,00(3)^\circ$

e N(4)-C(9)-N(3) $116,6(3)^\circ$ estão próximos do ângulo ideal de 120° , esperado para hibridização sp^2 dos referidos átomos e condizem com valores encontrados na literatura para as tiossemicarbazonas.

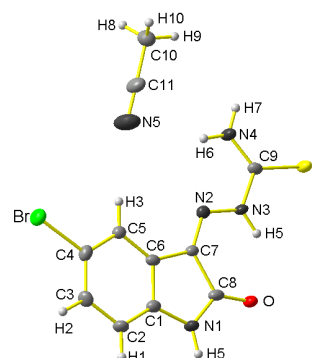


Figura 1. Estrutura da 5-bromoisatina-3-tiossemicarbazona. As elipsóides térmicas estão representadas com probabilidade de 50%.

A molécula apresenta conformação Z em relação a ligação C(7)-N(2) que possui comprimento de ligação $1,285(5)\text{Å}$, típica para uma ligação dupla C=N numa base de Schiff. A estrutura no estado sólido apresenta muitas interações intermoleculares (ex. $H(3)\cdots N(5)$ $2,563(1)$ e $H(6)\cdots N(5)$ $2,563(3)\text{Å}$), que não estão representadas na Figura 1.

Conclusões

A análise de difração de raios-X em monocristal confirma a obtenção da 5-bromoisatina-3-tiossemicarbazona. Essa apresenta um arranjo no estado sólido complexo possibilitando a realização de vários estudos dentro da área da química entre as quais, pode-se citar a química de coordenação.

Agradecimentos

F.R.S.P agradece a Capes/ Reuni pela bolsa concedida e a FAPERGS e Departamento de Química da Universidade Federal de Santa Maria .

¹ R.P. Tenório, A.J. S. Góes, J.G. de Lima, A.R. de Faria, A.J. Alves, T.M. de Aquino, Química Nova, **2005**, 28, 1030-1037.

² S. Sagdinić, B. Köksoy, F. Kanderimli, S. Bayari, J. of Molecular Structure, **2009**, 917, 63-70.