

Estudos espectroscópicos e estruturais do ligante aloxan-5-tiossemicarbazona

¹Viviane Conceição D. Bittencourt (PG)*, ¹Bruna C. da Silva (IC), ¹Jecika M. Velasques (IC), ¹Mona N. T. Bastos (IC), ¹Cândido Marzo M. Acosta (IC), ²Aline Locatelli (PG), ¹Leandro Bresolin (PQ), ¹Vanessa Carratu Gervini (PQ).

*vivi.quimica@yahoo.com.br

¹Universidade Federal do Rio Grande, RS – FURG

²Universidade Federal de Santa Maria, RS – UFSM

Palavras Chave: ligante, tiossemicarbazona, aloxan-5-tiossemicarbazona

Introdução

As tiossemicarbazonas têm despertado interesse devido às suas propriedades químicas, farmacológicas e biológicas, tais como antibacterial, antiviral, antifúngica e antitumoral¹⁻³. Além disso, essas propriedades têm sido extensamente estudadas devido à capacidade de formar quelatos com íons de metais de transição^{1,4}, sendo que esta é muitas vezes atribuída às propriedades biológicas das mesmas⁴. Esses ligantes são muito versáteis, podendo se coordenar ao metal de forma neutra ou até mesmo desprotonada^{1,4}. Neste trabalho, é apresentado o ligante aloxan-5-tiossemicarbazona, que foi caracterizado por espectroscopia na região do IV e difração de raios-X em monocristal.

Resultados e Discussão

A síntese do ligante aloxan-5-tiossemicarbazona se deu mediante a reação de aloxan com tiossemicarbazida, em etanol (1:1), em meio ácido sob refluxo por 7h. Após resfriamento, um precipitado laranja foi obtido por evaporação do solvente e o ponto de decomposição se deu em 279°C. Após recristalização em metanol, foram obtidos cristais de cor laranja. A caracterização espectroscópica na região do IV apresentou as seguintes bandas: (νC=S) 879cm⁻¹, (νC=O) 1664-1610cm⁻¹, (νC=N) 1516cm⁻¹, (νN-H) 3294-3055cm⁻¹, (νN-H_{term}) 3400cm⁻¹. De acordo com os dados cristalográficos obtidos, o composto apresenta fórmula empírica C₅H₅N₅O₃S, grupo espacial P12₁/n1, sistema cristalino monoclinico, a=10,6415(8)Å, b=7,3370(6)Å, c=11,1600(10)Å, β=107,380(5)° e Z=4. As ligações de hidrogênio intra e intermoleculares observadas ampliam as possibilidades de investigações quanto a atividade biológica. Estas ligações interrelacionam as moléculas através das ligações D-(H)···A (Å) cujas distâncias, ângulos e códigos de simetria são respectivamente: N(5)-H(5A)···O(2)¹, 2.25(4)Å, 144(3)°, x+1/2, -y+1/2, z+1/2; N(2)-H(2)···O(3)², 1.98(4)Å, 173(4)°, -x+1, -y, -z+2; N(5)-H(5B)···O(1)³, 2.08(5)Å, 158(4)°, x+1/2, -y+3/2, z+1/2; N(4)-H(4)···O(1)⁴, 2.02(4)Å, 126(4)°; N(1)-H(1)···O(3)⁵, 35ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

2.46(4)Å, 125(4)°, x-1/2, -y+1/2, z-1/2 e N(1)-H(1)···S(1)⁶, 3.03(4) Å, 123(4)°, -x, -y+1, -z+2

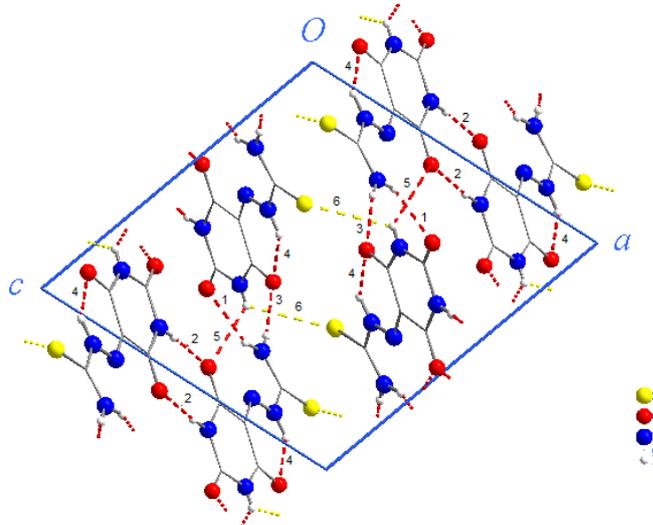


Figura 1: Representação estrutural das ligações de hidrogênio do ligante aloxan-5-tiossemicarbazona

Conclusões

Os estudos espectroscópicos e estruturais do ligante aloxan-5-tiossemicarbazona bem como alguns testes em andamento comprovam que o mesmo pode atuar como quelato, coordenando-se a diferentes centros metálicos através dos átomos de O, N e S. Além disso, a existência de diversas ligações de hidrogênio presentes na estrutura confere a esse ligante a ocorrência de estruturas supramoleculares, ampliando-se as possibilidades de investigações a cerca da atividade biológica.

Agradecimentos

LCSI-EQA/FURG, PPGQTA, UFSM, DECIT/SCTIE-MS-CNPq-FAPERGS-Pronem-11/2029-1, PRONEX-FAPERGS-CNPQ.

¹ Núñez-Montenegro, A.; Carbalho, R.; Hermida-Ramón, J. M.; Vázquez-López, E. M. *Polyhedron*, **2011**, *30*, 2146-2156.

² Fonseca, A.S. et al *Química Nova*, 2010, Vol. 33, 7, 1453-1456.

³ Beraldo, H. *Química Nova*, **2004**, Vol. 27, 3, 461-471.

⁴ El-Ayaan, U.; Youssef, M. M.; AL-Shihry, S. *Journal of Molecular Structure*, **2009**, 936, 213-219.

⁵ Pereiras-Gabián, G.; Vázquez-Lopez, E. M.; Braband, H.; Abram, U. *Inorganic Chemistry*, **2005**, *44*, 834-836.

