

## Estrutura cristalina/molecular do complexo de níquel (II) com o ligante 5-Bromoisatina-3-Tiossemicarbazona.

Katlen Bandeira<sup>1</sup> (PG)\*, Fernanda Pederzoli<sup>1</sup> (PG), Leandro Bresolin<sup>1</sup> (PQ), Vanessa Carratu<sup>1</sup> (PQ), Jean Arias<sup>1</sup> (IC), Mauricio Barbosa<sup>1</sup> (IC), Aline Locatelli<sup>2</sup> (PQ), Juliano Vicenti<sup>1</sup> (PQ)

\*ktribuzy@hotmail.com

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

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

Palavras Chave: 5-Bromoisatina-3-tiossemicarbazona, complexo de níquel, difração de raios-x

### Introdução

Compostos isatina-3-tiossemicarbazona e seus complexos metálicos apresentam uma ampla gama de propriedades biológicas, podendo ser destacadas: antibacteriana, antiviral, antituberculose, antitumoral e anti-HIV<sup>1,2</sup>. Estas propriedades são atribuídas, em muitos casos, a habilidade quelante das tiossemicarbazonas com íons metálicos. Os complexos de níquel tem sido amplamente estudados por apresentarem atividade antitumoral, atividade catalítica e por ser reconhecido que o níquel é essencial para bactérias, plantas, animais e seres humanos<sup>3</sup>. Dessa forma, o objetivo deste trabalho consiste em caracterizar o complexo de níquel (II) descrevendo a estrutura cristalina obtida com o ligante 5-Bromoisatina-3-Tiossemicarbazona.

### Resultados e Discussão

O complexo de níquel foi obtido a partir da reação de complexação do ligante 5-Bromoisatina-3-tiossemicarbazona com o acetato de níquel, utilizando-se uma razão molar de 2:1, dissolvidos em THF. Os cristais foram obtidos em DMSO, apresentando uma coloração marrom avermelhada. Possui um ponto de decomposição no intervalo de 135° a 200°C. O complexo é um octaedro distorcido, onde duas unidades desprotonadas de cada ligante 5-Bromoisatina-3-tiossemicarbazona atuam de forma tridentada "NOS-doador" coordenando-se ao íon níquel (II). As posições basais do octaedro são ocupadas pelos átomos oxigênio e enxofre. Nas posições axiais encontram-se os nitrogênios imínicos (Fig.1). Na tabela 1, podem ser observados os comprimentos de ligação e os ângulos do complexo de níquel(II). Os comprimentos de ligação e os ângulos deste complexo são similares a outros complexos de níquel com ligantes tiossemicarbazona. O complexo cristaliza no sistema triclinico e grupo espacial *P*-1. A cela unitária apresenta  $Z=4$ , volume 3091.39 (17) Å<sup>3</sup>, contendo 2 formas cristalograficamente independentes, conforme mostra a Figura1. Apresenta  $a=12,8831(4)$ Å,  $b=15,2517(5)$ Å e  $c=17,9919(6)$ Å e  $\alpha=107,8300(10)^\circ$ ,  $\beta=107,9120(10)^\circ$  e  $\gamma=98,1720(10)^\circ$ . O índice de discordância para  $I > 2\sigma(I)$  é igual a  $R_1=0,0582$  e  $wR_2=0,1863$ . Para a

correção de absorção utilizou-se o método multi-scan.

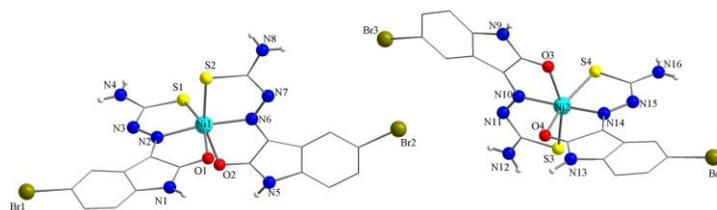


Figura 1. Representação da estrutura molecular do Complexo 5-Bromoisatina-3-Tiossemicarbazonato Níquel(II)

Tabela 1. Comprimento de ligação (Å) e ângulos (°) para [Ni(5-BrISBT)<sub>2</sub>].

Ni(1)-O(1)	2,203(5)	Ni(2)-O(3)	2,209(4)
Ni(1)-S(1)	2,357(2)	Ni(2)-S(3)	2,3597(19)
Ni(1)-N(2)	1,995(6)	Ni(2)-N(14)	2,001(6)
Ni(1)-O(2)	2,207(6)	Ni(2)-O(4)	2,236(5)
Ni(1)-S(2)	2,373(2)	Ni(2)-S(4)	2,370(2)
Ni(1)-N(6)	1,996(6)	Ni(2)-N(10)	2,023(6)
N(2)-Ni(1)-N(6)			125,8 (5)
S(1)-Ni(1)-S(2)			97,72(8)
O(1)-Ni(1)-O(2)			82,0(2)
N(10)-Ni(2)-N(14)			125,0(4)
O(3)-Ni(2)-O(4)			88,17(19)
S(3)-Ni(2)-S(4)			97,44(8)

### Conclusões

A análise de difração de raios X confirmou a obtenção do complexo de níquel com o ligante 5-Bromoisatina-3-tiossemicarbazona. O complexo apresentou um geometria octaédrica com o ligante atuando de forma tridentada "NOS-doador". A distorção da geometria molecular é justificada pelos ângulos de ligação muito diferentes de 90° e 180°.

### Agradecimentos

LCSI/FURG, PPGQTA, UFMS  
DECIT/SCTIE-MS-CNPq-FAPERGS-Pronem-  
11/2029-1  
FAPEAM – Fundação de Amparo à Pesquisa do  
Estado do Amazonas

<sup>1</sup>N. Karali *et al.* Bioorg. Med. Chem. 15 (2007) 5888.

<sup>2</sup>S.N. Pandeya *et al.* Indian J. Pharm. Sci. 60 (4) (1998) 207.

<sup>3</sup>M.A. Halcrow, G. Cristou, Chem. Rev. 94 (1994) 2421.