

CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA DO COMPOSTO 5-NITROISATINA- β -TIOSEMICARBAZONA.

Katlen Crhstian Tribuzy Bandeira^{1*} (PG), Viviane Conceição Duarte de Bittencourt¹ (PG), Mauricio Hilgemann Barbosa¹ (IC), Leandro Bresolin¹ (PQ), Vanessa Carratu Gervini¹ (PQ).

ktribuzy@hotmail.com

¹Universidade Federal do Rio Grande (FURG) – Escola de Química e Alimentos (EQA) - Laboratório de Catálise e Síntese Inorgânica (LCSI)

Palavras Chave: tiossemicarbazonas, infravermelho, ultravioleta-visível, RMN ¹H.

Introdução

As tiossemicarbazonas passaram a ser amplamente investigadas desde a identificação da atividade antitumoral desse composto, dando início aos estudos sistemáticos sobre a relação química entre estrutura química e atividade antiviral¹. Desde então vários compostos tiossemicarbazonas tem sido sintetizados, dentre eles as isatina- β -tiossemicarbazonas, que são moléculas promissoras para o combate a tumores que desenvolvem resistência múltipla a drogas². Sendo assim, o objetivo deste trabalho é descrever os estudos espectroscópicos de infravermelho, ultravioleta-visível e RMN ¹H do composto 5-nitroisatina- β -tiossemicarbazona.

Resultados e Discussão

Compostos tiossemicarbazonas apresentam bandas características no espectro de infravermelho, como os estiramentos N-H, C=N e C=S. Na obtenção do ligante a banda de interesse é o estiramento ν (C=N), que caracteriza a formação de compostos tiossemicarbazonas. Este estiramento ocorre devido ao ataque nucleofílico da tiossemicarbazida na carbonila- β da isatina. O reagente de partida 5-nitroisatina apresenta dois estiramentos ν (C=O) referentes as carbonilas α e β , nas regiões de 1770 e 1751. Com a reação de obtenção do pré-ligante, houve o desaparecimento da banda na região 1770 cm^{-1} , referente ao estiramento ν (C=O) da ceto carbonila- β ; e o surgimento do estiramento ν (C=N) com forte intensidade na região de 1620 cm^{-1} , que confirma a obtenção do pré-ligante 5-nitroisatina-3-tiossemicarbazona. A banda de forte intensidade referente ao estiramento ν (C=S) da função tioamida para o composto 5-nitroisatina-3-tiossemicarbazona ocorre em 1138 cm^{-1} . Este valor está próximo aos atribuídos para os compostos nitro-tiossemicarbazona. As análises no ultravioleta-visível foram realizadas em solventes com momentos dipolares diferentes. Estas análises evidenciaram que o composto sofre influencia do solvente, apresentando transições eletrônicas diferentes em uma mesma absorvância (Figura

1). O espectro de RMN ¹H foi realizado em DMSO- d_6 confirmou a forma protonada do composto e a ocorrência de ligações de hidrogênio, devido o aparecimento de sinais em regiões de campo baixo do grupo NH da porção tiossemicarbazona e isatina.

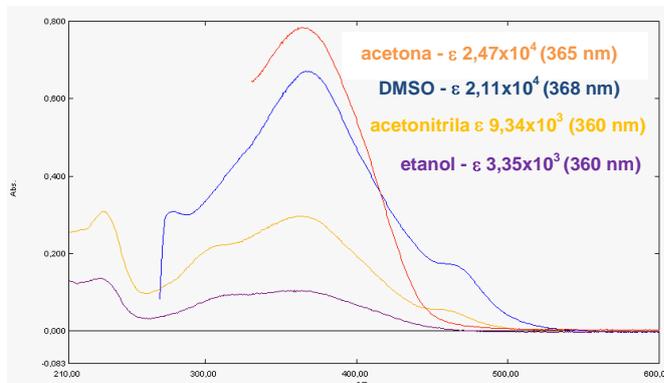


Figura 1. Espectro de comparação do composto 5-nitroisatina- β -tiossemicarbazona em ultravioleta-visível na faixa de 200-600nm com concentração de $3,18 \times 10^{-5} \text{ mol/L}$.

Conclusões

A obtenção do pré-ligante 5-nitroisatina- β -tiossemicarbazona foi confirmada pela análise de infravermelho. A espectroscopia de ultravioleta-visível do pré-ligante mostrou que o mesmo apresenta interações intermoleculares com o solvente a medida que se altera a polaridade do meio de análise e os dados de RMN ¹H confirmaram a protonação do pré-ligante.

Agradecimentos

FURG, CNPq, CAPES, REUNI

¹ BAUER, D.J. The antiviral and synergic actions of isatin-3-thiosemicarbazone in vaccinia infection in mice. *Br. J. Exp. Pathol.* London, v.36, p.105-109, 1955.

² HALL, M.D. *et al* Synthesis, Activity, and Pharmacophore Development for Isatin- β -thiosemicarbazones with Selective Activity toward Multidrug-Resistant Cells. *J. Med. Chem.*, v.52, p.3191, 2009,