

PROCEDIMENTOS SINTÉTICOS, CARACTERIZAÇÃO E ESTUDO DAS PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DE POTENCIAIS METALOFÁRMACOS BASEADOS EM ÍONS FÉRRICOS/FERROSOS E LIGANTES BIOATIVOS NATURAIS

¹CDTEQ - Centro de Desenvolvimento de Tecnologias Químicas, Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul – UEMS, Naviraí, MS, Brasil.

²PGRN - Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul, Cidade Universitária, Dourados, MS, Brasil.

Área temática: Química Inorgânica

SILVA, Larissa Lorryne Alves¹ (larihlorrynealves@gmail.com); MORAES, Leandro Alves¹ (leandroalves2020@gmail.com); MELO, Willian Ganther Nascimento¹ (ganther.nascimento@gmail.com); MELO, Vanessa Ferreira Favero^{1,2} (va_nessa210@hotmail.com); ANJOS, Ademir^{1,2} (piu_floripa@uems.br).

Estudos recentes evidenciaram que as naftoquinonas naturais apresentam propriedades antitumorais, anti-inflamatórias, antioxidantes, antifúngicas, imunomoduladoras, vírucidas, hepatoprotetoras, entre outras. A estrutura mais simples desta classe de compostos é a lausona, a qual apresenta algumas das propriedades bioativas descritas anteriormente, principalmente as antitumorais e as antimicrobianas. Os íons férrico (Fe^{3+}) são fundamentais para o organismo humano, sendo cofator de diversas enzimas essenciais e de outros processos bioquímicos. Dessa forma, em virtude da importância biológica da lausona e dos íons férricos, estuda-se neste trabalho a interação de ambos na formação de um novo composto de coordenação. A síntese do novo complexo foi obtida pela reação estequiométrica 3:1 (lausona/ Fe^{3+}), utilizando metanol e água destilada como solventes e a trietilamina como desprotonante. O ponto de fusão obtido para a lausona é de 194°C , já para o complexo observou-se que não ocorre a fusão até o ponto máximo de 360°C . O complexo apresenta menor solubilidade em quase todos os solventes testados quando comparado a naftoquinona, sendo solúvel apenas em dimetilsulfóxido e dimetilformamida. Na espectroscopia vibracional/rotacional na região do infravermelho observa-se que a coordenação gera alterações das bandas referentes à lausona, verificando-se principalmente: i) o desaparecimento do pico em 3170 cm^{-1} , referente ao estiramento da ligação $\nu(\text{O}-\text{H}_{\text{fenol}})$ do grupamento fenol; ii) desaparecimento do processo $\nu(\text{C}=\text{O}_{\text{carbonila}})$ em 1641 cm^{-1} ; iii) deslocamento da banda referente ao estiramento da segunda carbonila ($\nu(\text{C}=\text{O})$) de 1678 para 1634 cm^{-1} (ligante para complexo). O perfil eletrônico do complexo é aparentemente similar ao da lausona, com valores próximos de comprimento de onda máximos; entretanto, os estudos de absorvidade molar mostram claramente um efeito de hiperromismo para todos os processos, em particular para a banda com $\lambda_{\text{máx.}} = 457\text{ nm}$, a qual é atribuída a um processo de transferência de carga ligante-metal (TCLM) do $\text{O}_{\text{fenolato}} \rightarrow \text{Fe(III)}$. Todos os resultados indicam a formação do novo composto de coordenação, inferindo também informações a respeito da sua possível estrutura conformacional.

PALAVRAS-CHAVE: Naftoquinona, Íon metálico essencial, Estudo físico-químico.

AGRADECIMENTOS: PIBIC/CNPq, FUNDECT/MS, UEMS, CAPES, PGRN, CDTEQ e LBBTEC.