

Estrutura, potenciometria e atividade biológica do mandelato de prata

*Alexandre Cuin¹ (PQ), Ademir Neves¹ (PQ), Antonio C. Massabni² (PQ), Clarice Q. F. Leite³ (PQ), Dayse N. Sato³ (PQ), Bruno Szpoganicz⁴ (PQ), Marlon S. Silva⁴ (PG), Adailton J. Bertoluzzi¹ (PQ). alexandre_cuin@yahoo.com

¹Labinc – Lab Bioinorg e Cristallog – Dep Quím CFM, UFSC, Trindade, Florianópolis-SC, CEP 88040-900. ²Dep Quim Geral e Inorg, UNESP, Rua Francisco Degni s/n, Quitandinha, Araraquara-SP, CEP 14800-970. ³Dep Ciências Biológicas, Fac Ciências Farm, UNESP, Km 1, rdv Araraquara-Jaú, Araraquara-SP. ⁴Equilíbrio Químico, Dep Quím CFM, UFSC, Trindade, Florianópolis, SC, CEP 88040-900

Palavras Chave: bioinorgânica, prata, ácido mandélico

Introdução

Complexos metálicos são utilizados na medicina para tratamento de diversas enfermidades. Os complexos de prata(I), por exemplo, são empregados como agentes bactericidas^[1,2]. Muitos dos complexos existentes não são solúveis em água^[3], o que limita seu uso em cremes e emulsões. Na busca de novos complexos de Ag(I) com atividades farmacológicas e solúveis em água, foi preparado e caracterizado o complexo com o ácido mandélico (C₈H₈O₃) e o íon Ag(I). O ácido mandélico é um ácido alfa-hidroxicarboxílico natural e tem sido utilizado em complexos com atividade antitumorais^[4].

Ensaio biológicos foram realizados com o objetivo de determinar a atividade bactericida do complexo mandelato de prata. Os testes foram realizados utilizando-se as micobactérias: *m.tuberculosis*, *m.avium*, *m.kansasii*.

Resultados e Discussão

O complexo de prata com ácido mandélico foi obtido dissolvendo-se em soluções aquosas quantidades equimolares de AgNO₃ e do ácido mandélico. Após 10 minutos sob agitação e ao abrigo da luz, o composto sólido pode ser obtido após adição de etanol à solução. Após a filtração, cristais são obtidos na solução-mãe após dois ou três. Os cristais foram coletados e analisados por análise elementar (C,H), difratometria de Raios X – método cristal, análise térmica (TG-DTA), espectroscopia RMN ¹³C em D₂O. Em solução aquosa, as espécies foram identificadas por titulação potenciométrica. Através da Análise Elementar a fórmula proposta é [Ag(C₈H₇O₃)]. É possível observar na curva TG que a perda de massa se inicia acima de 150°C e termina em 450°C, o resíduo formado nessa temperatura foi identificado por difratometria de raios X (pó) como sendo prata metálica^[5].

No espectro de RMN ¹³C (D₂O) do complexo os picos atribuídos aos grupos (COO-) e (αCOH) são observados em 181 e 77,5ppm. No ácido puro, estes picos são observados em 73,2 e 176,5 ppm, Os

deslocamentos observados evidenciam que a coordenação do ligante ocorre por ambos grupos.

O mandelato de prata possui estrutura monoclinica e os parâmetros de cela são: a=16.3040(10)Å; b=4.750(6)Å; β=95.27(2)° e c=10.393(6)Å. Este complexo é isoestrutural ao complexo glicolato de prata^[6]. Sua estrutura polimérica bidimensional se baseia em dois dímeros diferentes e independentes bis(carboxilato-O,O'), como descrito na Figura 1.



Figura 1: Dímeros do complexo mandelato de prata. Onde temos os átomos em diferentes cores, **oxigênio**, **carbono**, **prata**. Hidrogênios não são mostrados.

Através da titulação potenciométrica realizada de pH 2 a pH 12, pode-se observar que em pH=2 cerca de 10% dos íons Ag(I) estão complexados com o ligante formando a espécie 2:2 metal:ligante. Na faixa de pH de 4,5 a 8, esta espécie atinge seu máximo de 30%. Acima do pH 8 a espécie 2:2 decresce e em pH 10,5 a sua concentração é menor que 0,5%.

O composto mandelato de prata foi testado em relação à sua atividade antimicobacteriana. Os resultados de concentração inibitória mínima (CIM) obtidos são de 16 µg/mL para *Micobacterium tuberculosis*, de 4 µg/mL para *M.avium*, e de 8 µg/mL para para *M.kansasii*.

Conclusões

O composto obtido a partir de Ag(I) com o ácido mandélico é solúvel em água e estável na faixa de pH 4,5 a 8. O complexo é um bom agente micobactericida, com máximo de CIM de 4 µg/mL⁻¹ contra *M.Avium*.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq pelo Incentivo

¹ Klasen, H.J.; *Burns*, **26**, 117, 2000

² Klasen, H.J.; *Burns*, **26**, 131, 2000

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

- 3 Nomiya, K., et al.; *J.Inorg. Biochem.*, 58, 255, 1995
- 4 ICDD. **PDFR 1999**: data sets 1-49 plus 70-86 PDF. Pennsylvania, 1999. File 04-0783 Ag Silver. 1 CD-ROM.
- 5 Brunner, H.; Maiterth, F. and Treittinger, B.; *Inorg. Chim Acta*, **198-200**, 79, 1992.
- 6 Smith G., Reddy An., Byriel K.A., Kennard C.H.L., *Austr J. Chem.*, 47:(6)1179-1183, 1994.