

Síntese, cristalquímica e atividade biológica de um novo complexo tetranuclear de Ni(II) com 2-hidroxibenzofenona e metanol

Iara M. L. Rosa*(PG), Paulo C. M. Villis (PQ), Antonio C. Doriguetto (PQ) iara_landre@yahoo.com.br

Laboratório de Cristalografia, Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, Brasil-MG.

Palavras Chave: *Cristalquímica, difração de raios X, complexo de Ni.*

Introdução

Polifenólicos, como as benzofenonas poli-hidroxiladas, exibem um amplo alvo de efeitos biológicos, como ação anti-microbiana, antiinflamatória e anti-carcinogênica, sendo estas funções atribuídas as propriedades anti-oxidantes.¹ É bem sabido que complexos de níquel(II) possuem diversas propriedades química e tecnológicas, sendo extensivamente utilizados em separações químicas, sorção e catálise.² Tendo em vista as propriedades biológicas das hidroxibenzofenonas, objetivou-se a coordenação destes ligantes ao Ni(II) a fim de se estudar a ação que o metal provoca sobre as funções biológicas já presentes nesta classe de moléculas.

Resultados e Discussão

O complexo foi sintetizado partir de Ni(NO₃)₂.6H₂O (0,25 mmol) e 2-hidroxibenzofenona (0,50 mmol) em meio metanólico sob constante agitação, sendo o produto caracterizado por espectroscopia vibracional na região do infravermelho (IV) e CHNO-S. Cristais paralelepípidicos verdes foram obtidos a partir da lenta evaporação do solvente (metanol). As medidas de difração de raios X de monocristal foram realizadas no Laboratório de Cristalografia (LabCri) da UFMG, utilizando a radiação Mo-K_α (0,71073) do difratômetro Gemini-Oxford à 120 K, obtendo os principais dados cristalográficos: Grupo espacial triclinico, P-1, *a* = 13,456(5) Å, *b* = 15,791(5) Å, *c* = 16,121(5) Å, α = 60,701(5)°, β = 75,113(5)°, γ = 79,824(5)°, *V* = 2882(2) Å³, *Z* = 2, *R*1 = 0,0560, *wR*2 = 0,1329, *S* = 0,916. A unidade assimétrica é constituída por quatro octaedros constituídos por quatro átomos de Ni coordenados a quatro moléculas de 2-benzofenonato e oito metanolatos, como mostrado na Fig 1. Os átomos de níquel realizam ligações intermetálicas, sendo a distância entre cada átomo aproximadamente 3,100Å. Ainda no âmbito intramolecular, vale destacar o ângulo de torção entre os anéis do ligante. Para o ligante puro³ este ângulo vale 52,84(3) Å, enquanto que no ligante complexado o valor médio é igual a 52,43(6) Å. É

de grande interesse o estudo do ângulo de torção, visto que este influencia diretamente na atividade anti-oxidante dos polifenólicos.¹ As distâncias interatômicas e ângulos de ligação foram analisados com o auxílio do software MOGUL, apontando ambos não desviam para o esperado quimicamente.

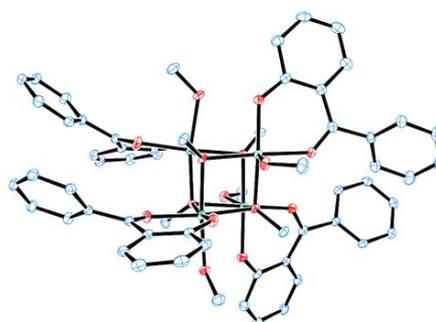


Figura 1. Representação ORTEP do complexo, elipsóides a 50% de probabilidade. Os rótulos foram omitidos para melhor visualização da estrutura.

Analizando a estrutura supramolecular verificou-se a ausência de ligação de hidrogênio clássica inter e intramoleculares, logo o empacotamento cristalino é estabilizado somente por interações fracas de Van der Waals.

Foram realizados testes anti-microbianos para este complexo, utilizando os fungos *Candida albicans*, *Candida glabrata*, *Candida crusei*, *Candida tropicalis* e *Cryptococcus neoformans*, sendo observada atividade sobre os dois últimos fungos.

Conclusões

A estrutura cristalina do complexo foi determinada por meio de difração de raios X por monocristal e suas estruturas molecular e supramolecular foram analisadas e comparadas em termos de efeitos estéricos, indutivos e supramoleculares.

Agradecimentos

FAPEMIG, CNPq, PIBIC-Unifal-MG, CAPES FINEP pelo apoio financeiro e LabCri (UFMG).

¹ COX, P. J., KACHAGIAS, D.; KELLY, O., *ACTA CRYST. B*, **2008**, 64, 206-216.

² SWIERGERS, G. F.; MALEFETSE, T. J. *COORDINATION CHEMICAL REVIEWS*, v. 225, p. 91, 2002.

³ SCHLEMPER, E. O. *ACTA CRYST. B*, **1982**, 38, 1619-1622.