

Mestranda: Letícia Barbosa de Oliveira

Orientador: Prof. Dr. Gleison Antônio Casagrande

Título: Síntese, caracterização e ensaios antibacterianos de complexos de Au(I) com ligantes contendo núcleos pirazolínicos 1,3,5-trissubstituídos.

Resumo

Ligantes contendo núcleos pirazolínicos, bem como seus derivados substituídos, têm sido amplamente estudados devido às suas propriedades fotofísicas e biológicas. Publicação recente, realizada pelo nosso grupo de pesquisa, mostra que o ligante em estudo possui propriedade luminescente quando excitado em solução em 300 nm e que, ao ser complexado com um centro metálico de Ag^{I} essa propriedade foi intensificada. Complexos de ouro, por sua vez, podem apresentar atividades biológicas tais como ação antitumoral, antibacteriana e anti-biofilme para *Staphylococcus aureus*. Neste trabalho apresentaremos a síntese, caracterização e ensaios antibacterianos de dois complexos inéditos de Au^{I} . Os novos complexos $[\text{Au}(\text{L}^1)\text{Cl}] \cdot 1/2\text{DMF}$ (**1a**) e $[\text{Au}(\text{L}^2)\text{Cl}]$ (**2**) onde $\text{L}^1 = 5-(4\text{-metoxifenil})-3\text{-fenil}-1\text{-tiocarbamoil}-4,5\text{-diidro}-1\text{H-pirazol}$; $\text{L}^2 = 3,5\text{-difetil}-1\text{-tiocarbamoil}-4,5\text{-diidro}-1\text{H-pirazol}$, Figura 1. O ligante de cada um dos respectivos complexos se coordenou-se ao centro metálico de Au^{I} através do átomo de enxofre do grupamento tiocarbamoil de maneira monodentada. Um átomo de cloro, proveniente do precursor $[\text{THTAuCl}]$ (THT = tetrahidrotiofeno), complementa o sítio de coordenação do átomo de Au^{I} . A análise dos ângulos de ligação para o complexo (**1a**) $\text{S}(1)\text{-Au}(1)\text{-Cl}(1)$ de $174,29(3)^\circ$ e $\text{S}(2)\text{-Au}(2)\text{-Cl}(2)$ de $172,73(3)^\circ$ e para o complexo (**2**) $\text{S}(1)\text{-Au}(1)\text{-Cl}(1) = 172,10(8)^\circ$ demonstra uma geometria aproximadamente linear para os compostos preparados. Além da difração de raios X em monocristais, os complexos inéditos foram caracterizados por espectroscopia vibracional (Infravermelho $4000\text{-}400\text{ cm}^{-1}$), espectroscopia de absorção molecular UV-Vis $800\text{-}200\text{ nm}$ e Ressonância Magnética Nuclear de ^1H e ^{13}C . Cálculos de Orbital Molecular via TD-DFT (Teoria do Funcional da Densidade Dependente do Tempo) foram elaborados visando-se compreender as origens das principais transições eletrônicas apresentadas pelos complexo (**1b**) e (**2**) bem como para confrontar os dados espectroscópicos teóricos com os experimentais via simulação de espectros de UV-Vis. Os ensaios antibacterianos mostraram que tanto o composto (**1b**) quanto o composto (**2**) são bactericidas ou bacteriostáticos para as cepas gram-positivas: *S. aureus* padrão, *S. aureus* resistentes a diversos tipos de antibióticos e *S. intermedius*, em concentrações que variam de $0,98$ à $31,25\text{ }\mu\text{g/mL}$. Tendo em vista os dados da literatura estes novos complexos, se mostram promissores candidatos a novos agentes bactericidas.

Palavras-chave: pirazol, complexo, ouro, antibacteriano.

Figura 1: (direita) complexo $[\text{Au}(\text{L}^2)\text{Cl}]$ (**2**); (meio) $[\text{Au}(\text{L}^1)\text{Cl}]$ (**1b**); (esquerda) $[\text{Au}(\text{L}^1)\text{Cl}] \cdot 1/2\text{DMF}$ (**1a**). Legenda: Au: laranja; N: azul; Cl: verde; S: amarelo; C: cinza; O: vermelho.

