



E0716

SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO, ESTUDOS TEÓRICOS POR DFT E ATIVIDADES ANTIBACTERIANAS E ANTITUMORAIS DE UM COMPLEXO INÉDITO DE PT(II) COM NIMESULIDA

Raphael Enoque Ferraz de Paiva (Bolsista PIBIC/CNPq), Sílvia M. Shishido, Carmen V. Ferreira, André L. B. Formiga e Prof. Dr. Pedro Paulo Corbi (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A nimesulida (NMS) é um fármaco antiinflamatório utilizado no tratamento de processos inflamatórios agudos ou crônicos do trato respiratório e da cavidade oral. A presença do grupo sulfonamida (SO_2NH) torna a NMS um ligante versátil do ponto de vista da química de coordenação. O presente trabalho descreve a síntese e caracterização de um novo complexo de Pt(II) com NMS. A síntese do complexo foi realizada em solução, a partir da NMS e do $\text{K}_2[\text{PtCl}_4]$. A análise elementar de CHN sugere uma composição 1:2 metal/ligante. A espectroscopia de RMN [^1H - ^{15}N] indica a coordenação da NMS à Pt(II) pelo átomo de nitrogênio do grupo SO_2NH , que é deslocado de 115,1 ppm na NMS livre para 177,6 ppm no complexo. O espectro vibracional no IV do complexo sugere que um dos átomos de oxigênio do grupo SO_2NH também participa da coordenação. Estudos teóricos por DFT confirmam a estrutura proposta com base nos resultados experimentais como um mínimo na superfície de energia potencial, com o cálculo das hessianas não exibindo frequências imaginárias. O ensaio de redução MTT mostrou a atividade citotóxica do complexo sobre células Panc-1 (carcinoma pancreático humano) e SK-Mel 103 (melanoma humano), com valores de IC_{50} de ordem micromolar. O complexo apresentou maior citotoxicidade sobre células tumorais do que sobre células saudáveis.

Complexos metálicos - Bioinorgânica - Ensaio biológicos