

## Preparation, Spectroscopic Characterizations, Thermal Analysis and Antioxidant Assessment of the Se(IV) Folate Complex

Fatima A.I. AL-KHODIR \*

*Department of Chemistry, College of Science,  
Princess Nourah Bint Abdulrahman University, Saudi Arabia*

**SUMMARY.** Preparation and characterization of new selenium(IV) folic acid ( $H_2FO$ ) complex is discussed. The coordinated behavior of the  $H_2FO$  chelate and its Se(IV) complex structures have been described based on spectroscopic (infrared, Raman, electronic,  $^1H$ -NMR, and mass) analytical techniques. The  $H_2FO$  acts as a chelate bi-dentate ligand with coordination involving the O atom of the two carboxylate groups. The  $H_2FO$  ligand forms bi-ligand complex with general formula  $[Se(FO)_2(H_2O)_2]$  where FO is bi-dentate ligand with bi-negatively charge. The infrared, Raman, electronic,  $^1H$ -NMR, and mass spectra measurement are used to identify the structure and to refer to the coordination place. Thermal analyses is used to detect the crystallization and coordinated water molecules while the decomposition of the FO ligand occur in the second sequent stage. Thermodynamic kinetic parameters as activation energy ( $E^*$ ), enthalpy of activation ( $\Delta H^*$ ), entropy of activation ( $\Delta S^*$ ) and free energy change of activation ( $\Delta G^*$ ) are estimated using Coats and Redfern equation. The surface morphology and particle size of Se(IV) folate complex is examined using X-ray powder diffraction (XRD) and scanning electron microscope (SEM) analyzer. Screening of antioxidant activities of selenium(IV) folate complex *in-vitro* is investigated. The antioxidant activity is studied by three methods (DPPH assay;  $\beta$ -Carotene/linoleic acid a bleaching assay and ferric reducing power assay; the studied folate complex has a significant antioxidant activity compared to synthetic antioxidants like trolox and BHT.

**RESUMEN.** Se discute la preparación y caracterización del nuevo complejo de ácido fólico de selenio (IV) ( $H_2FO$ ). El comportamiento coordinado del quelato  $H_2FO$  y sus estructuras complejas Se(IV) se han descrito en base a técnicas analíticas espectroscópicas (infrarroja, Raman, electrónica,  $^1H$ -NMR y masa). El  $H_2FO$  actúa como un ligando bi-dentado quelado con coordinación que implica el átomo de O de los dos grupos carboxilato. El ligando  $H_2FO$  forma un complejo bi-ligando con la fórmula general  $[Se(FO)_2(H_2O)_2]$  donde FO es un ligando bi-dentado con carga bi-negativa. La medición infrarroja, Raman, electrónica,  $^1H$ -NMR y espectros de masas se utilizan para identificar la estructura y para referirse al lugar de coordinación. Los análisis térmicos se usan para detectar la cristalización y las moléculas de agua coordinadas, mientras que la descomposición del ligando FO ocurre en la segunda etapa consecutiva. Los parámetros cinéticos termodinámicos como energía de activación ( $E^*$ ), entalpía de activación ( $\Delta H^*$ ), entropía de activación ( $\Delta S^*$ ) y cambio de energía libre de activación ( $\Delta G^*$ ) se estiman utilizando la ecuación de Coats y Redfern. La morfología de la superficie y el tamaño de partícula del complejo de folato de Se(IV) se examina utilizando difracción de rayos X en polvo (XRD) y microscopía electrónica de barrido (SEM). Se investiga el cribado de las actividades antioxidantes del complejo de folato de selenio(IV) *in vitro*. La actividad antioxidante se estudia mediante tres métodos (ensayo DPPH, ensayo de blanqueo con  $\beta$ -caroteno/ácido linoleico y ensayo de potencia de reducción férrica; el complejo de folato estudiado tiene una actividad antioxidante significativa en comparación con antioxidantes sintéticos como trolox y BHT.

**KEY WORDS:** antioxidant, chelation, folic acid, nano-particles, selenium, spectroscopic.

\* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: fatimaalkhodir@yahoo.com