

## Síntese e caracterização de um nitrosilo complexo de rutênio com o ligante cyclam mono-N-funcionalizado com o cromóforo antracênico.

Rodrigo G. S. Gois(IC)\*<sup>1</sup>, Elisangela F. Boffo(PQ)<sup>2</sup>, Zênis N. da Rocha(PQ)<sup>1</sup>, Fábio G. Doro(PQ)<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Pesquisa em Química de Coordenação, Depto. de Química Geral e Inorgânica, IQ-UFBA, Salvador, BA.

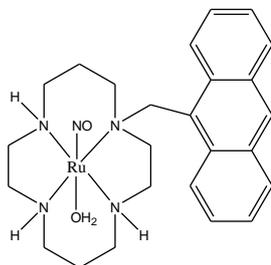
<sup>2</sup>LABAREM-Depto de Química Orgânica, IQ-UFBA, Salvador, BA. <sup>3</sup>Depto de Química, FFCLRP-USP, Ribeirão Preto, SP. \*rodrigo\_gibaut@hotmail.com

**Palavras Chave:** rutênio, nitrosilo, cromóforo.

### Introdução

O estudo de nitrosilo complexos de rutênio com tetraazamacrociclos como o cyclam (1,4,8,11-tetraazacicloctadecano) e seus derivados mono-N-funcionalizados tem sido um de nossos objetivos [1,2]. A presença do grupo funcional pode ou não alterar a estrutura e conseqüentemente as propriedades químicas desses complexos [2]. A escolha adequada do grupo funcional se constitui em uma estratégia interessante quer seja para modelar a reatividade destes complexos quer seja para aumentar ou direcionar sua interação com alvos biológicos.

Com o objetivo de explorar essas possibilidades, neste trabalho relatamos a síntese e caracterização do complexo *trans*-[Ru(NO)(H<sub>2</sub>O)(cyclam-ant)](ClO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> (I) (ant = antracênilmetil), Figura 1.



**Figura 1.** Representação da estrutura do complexo I.

### Resultados e Discussão

O complexo I foi sintetizado através da reação entre RuNOCl<sub>3</sub> e o ligante 1-(9-antracênilmetil)cyclam em DMF a 90 °C. O produto de reação foi isolado e hidrolisado em solução aquosa ácida (pH 1, 40 °C) na presença de AgNO<sub>3</sub> por 24 h. A solução foi filtrada e concentrada e o precipitado formado coletado por filtração. O complexo foi caracterizado por espectrometria de massas (ESI-MS) e microanálise (C,H,N), espectroscopia eletrônica de absorção (UV-Vis) e emissão de fluorescência, e vibracional (FTIR). A caracterização estrutural em solução foi realizada por RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C e técnicas bidimensionais como COSY, HSQC e HMBC. O espectro de ESI-MS apresentou uma cluster em m/z 638,1 o qual é consistente com o par iônico

37<sup>ª</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

{Ru(NO)(OH)(cyclam-ant)<sup>2+</sup>, ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>}<sup>+</sup>. Os dados concordam com os resultados de microanálise (C<sub>25</sub>H<sub>36</sub>N<sub>5</sub>O<sub>14</sub>RuCl<sub>3</sub>, 838.01 g mol<sup>-1</sup>) %C,H,N exp. (calc.) 36,58(35,83), 4,61(4,33), 8,72 (8,36).

O espectro de FTIR apresentou uma banda referente ao ν<sub>NO</sub> em 1840 cm<sup>-1</sup> consistente com o caráter nitrosônio do NO coordenado e bandas em 3430 cm<sup>-1</sup>(νOH), 1628 cm<sup>-1</sup>(δOH) e 950 cm<sup>-1</sup>(νRu-OH<sub>2</sub>) que ratificam a presença do ligante aqua. O espectro de UV-Vis (HTFA, pH 1) é dominado por uma banda π-π\* intensa devido presença do cromóforo, λ nm / (εx10<sup>-3</sup> mol<sup>-1</sup>Lcm<sup>-1</sup>) 397(8,14), 378(9,25), 363(8,09), 341 sh (5,57). O espectro de emissão (λ<sub>exc</sub>=370 nm) do complexo apresentou bandas de fraca intensidade em 394, 418, 444 e 462 nm características da fluorescência π-π\* do antraceno indicando que a emissão do cromóforo é, ao menos parcialmente, suprimida pelo centro {RuNO}<sup>6</sup>. Os dados de RMN indicam a presença de um único isômero. Através das técnicas utilizadas foi possível realizar a atribuição completa do espectro de RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C a qual está de acordo com a configuração *trans* proposta para o complexo.

### Conclusões

Neste trabalho foi sintetizado e caracterizado o complexo *trans*-[Ru(NO)(H<sub>2</sub>O)(cyclam-ant)](ClO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> o qual contém em sua estrutura o cromóforo antraceno. A presença do grupo funcional não altera a configuração mais comumente observada para essa classe de complexos. Este grupo pode proporcionar uma interação por intercalação do complexo com DNA enquanto o ligante aqua pode ser substituído por um resíduo básico da biomolécula produzindo uma potencial interação multiponto.

### Agradecimentos

CNPq, FAPESB e UFBA

[1] Tfouni, E.; Ferreira, K.Q.; Doro, F.G.; Da Silva, R.S.; da Rocha, Z.N. *Coord. Chem. Rev.* **2005**, 249, 405.

[2] Doro, F.G.; Pepe, I.M.; Galembeck, S.E.; Carlos, R.M.; da Rocha, Z.N. Bertotti, M.; Tfouni, E. *Dalton Trans.* **2011**, 40, 6420.