

Síntese, caracterização e estrutura cristalina do complexo *cis*-[Ru(3-hpic)(dppm)₂]PF₆

Ronaldo O. Guimarães¹(IC)*, Pedro I.S. Maia²(PQ) e Gustavo Von Poelhsitz¹(PQ)

¹Instituto de Química, UFU, Uberlândia-MG, CEP: 38400-902.

²Instituto de Ciências Naturais, Exatas e Educação, UFTM, Uberaba-MG, CEP:38064-200.

*ronaldogms96@hotmail.com

Palavras Chave: rutênio(II), dppm, 3-hidroxicicolinato, estrutura cristalográfica

Abstract

Synthesis, characterization and crystal structure of the complex *cis*-[Ru(3-hpic)(dppm)₂]PF₆

A ruthenium(II) complex containing 3-hydroxypicolinate and dppm was obtained and characterized, including crystal structure.

Introdução

Ácidos piridinocarboxílicos e seus derivados apresentam interessantes propriedades fisiológicas, em especial anti-inflamatórias¹. Outros compostos que tem despertado interesse por seu potencial como fármacos em diversas patologias são os complexos de rutênio(II) contendo bifosfinas em suas estruturas²⁻⁵. Por exemplo, complexos do tipo *cis*-[Ru(pic)(P-P)₂]PF₆, pic = picolinato; P-P = bifosfina aromática, foram ativos contra a micobactéria da tuberculose apresentando boa seletividade e moderada toxicidade^{2,5}. Neste trabalho apresenta-se a síntese, caracterização e estrutura cristalina do complexo *cis*-[Ru(3-hpic)(dppm)₂]PF₆, 3-hpic = 3-hidroxicicolinato; dppm = 1,1-bis(difenilfosfina)metano.

Resultados e Discussão

A síntese do novo complexo foi feita a partir da reação do precursor *cis*-[RuCl₂(dppm)₂] com o ácido 3-hidroxicicolínico utilizando metanol como solvente e aquecimento sob refluxo, e precipitado com o contra-íon PF₆⁻. A estrutura do produto foi elucidada pelas técnicas de RMN ³¹P{¹H}, espectroscopia no I.V. e análise elementar (CHN), além da cristalografia de raios-X. Os principais dados de caracterização do produto obtido são:

C₅₆H₄₈NO₃F₆P₅Ru. Análise elementar,%(Calc/Exp): C=58,34/58,65; H=4,20/4,27; N=1,21/1,27. RMN ³¹P{¹H}: 2,10 (ddd), -6,79 (ddd), -15,10 (ddd) e -20,95 (ddd) ppm. Rend.: 89%.

Os quatro sinais observados no espectro de RMN ³¹P{¹H} (integral 1:1:1:1) condizem com a substituição dos ligantes cloridos e coordenação do ligante 3-hpic pelos átomos de nitrogênio e o oxigênio do carboxilato, levando a uma estrutura com os quatro fósforos quimicamente e magneticamente não equivalentes. No espectro I.V. observou-se as bandas características dos ν_{as} e ν_s do grupo carboxilato em 1640 e 1322 cm⁻¹. A estrutura cristalina do complexo (figura 1) indica um

arranjo octaédrico distorcido e comprova a coordenação do ligante 3-hpic na forma bidentada (N e O).

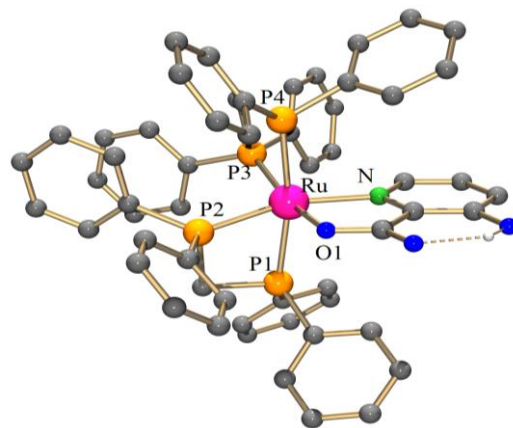


Figura 1. Estrutura ORTEP do cátion complexo *cis*-[Ru(3-hpic)(dppm)₂]⁺ mostrando a numeração de alguns átomos e as elipsóides de 50% de probabilidade.

Conclusões

Um novo complexo de rutênio(II) foi obtido com grau de pureza satisfatório. As técnicas espectroscópicas e a difração de raios-X são concordantes e permitem identificar a coordenação bidentada (via N e O) do ligante 3-hpic. Estudos do potencial farmacológico do complexo estão em andamento.

Agradecimentos

FAPEMIG, CNPq, CAPES, Rede Mineira de Química

¹ Brun, P.; Dean, A.; Di Marco, V.; Surajit, P.; Castagliuolo, I.; Carta, D. e Ferlin, M. G. *Eur. J. Med. Chem.* **2013**, *62*, 486.

² Pavan, F. R.; Von Poelhsitz, G.; Nascimento, F.B.; Leite, S.R.A.; Batista, A.A.; Defflon, V.M.; Sato, D.N.; Franzblau, S.G. e Leite, C.Q.F. *Eur. J. Med. Chem.* **2010**, *45*, 598.

³ Lopes, J.C.S.; Damasceno, J.L.; Oliveira, P.F.; Guedes, A.P.M.; Tavares, D.C.; Defflon, V.M.; Lopes, N.P.; Pivatto, M.; Batista, A.A.; Maia, P.I.S. e Von Poelhsitz, G. *J. Braz. Chem. Soc.* **2015**, *26*, 1838.

⁴ Santos, E.R.; Mondelli, M. A.; Pozzi, L. V.; Corrêa, R. S.; Salistre-de-Araújo, H. S.; Pavan, F. R.; Leite, C. Q. F.; Ellena, J.; Malta, V. R. S.; Machado, S. P. e Batista, A. A. *Polyhedron* **2013**, *51*, 292.

⁵ Pavan, F.R.; Von Poelhsitz, G.; da Cunha, L.V.P.; Barbosa, M.I.F.; Leite, S.R.A.; Batista, A.A.; Cho, S.H.; Franzblau, S.G.; de Camargo, M.S.; Resende, F.A.; Varanda, E.A. e Leite, C.Q.F. *Plos One* **2013**, *5*, e64242.