

Síntese e caracterização de compostos de coordenação de rutênio(II) contendo ligantes pirazólicos.

Talita P. da C. Neves (PG)*, Rafael L. Fernandes (PG), Patrícia B. da Silva (PG), Adelino V. G. Netto (PQ), Luiz Antonio A. de Oliveira (PQ), Antonio E. Mauro (PQ) e Regina C. G. Frem (PQ)

Departamento de Química Geral e Inorgânica – Instituto de Química de Araraquara – UNESP – Araraquara - SP

*talineves@yahoo.com.br

Palavras Chave: complexos de rutênio(II), ligantes pirazólicos, dimetilsulfóxido.

Introdução

Compostos de coordenação de rutênio (II) e (III) contendo dimetilsulfóxido juntamente com ligantes heterocíclicos têm atraído grande interesse da comunidade científica por possuírem ampla atividade antitumoral^{1,2}. Entretanto, complexos pirazólicos de rutênio ainda não receberam a devida atenção. Este trabalho apresenta a síntese e a caracterização espectroscópica de três espécies de fórmula geral $[RuCl_2(DMSO)_2(L)_2]$, onde L = HPz (pirazol) (1), HdmPz (3,5-dimetilpirazol) (2), HIdmPz (4-iodo-3,5-dimetilpirazol) (3).

Resultados e Discussão

Os compostos foram preparados pela reação entre o precursor $[RuCl_2(DMSO)_4]$ e ligantes pirazólicos na razão molar 1:4. A mistura foi deixada sob refluxo e agitação magnética em MeOH. Os dados de análise elementar para os compostos 1-3 (Tabela 1) concordam com as fórmulas propostas.

Tabela 1. Análise elementar dos compostos 1-3.

Comp.	%C		%N		%H	
	O.	C.	O.	C.	O.	C.
1	26,1	25,8	12,2	12,1	4,3	4,3
2	33,6	32,3	12,0	10,8	5,4	5,4
3	23,2	21,8	7,5	7,3	3,7	3,4

O. = obtido, C. = calculado

A análise do espectro no IV dos compostos 1-3 permitiu evidenciar a coordenação dos pirazóis neutro através das bandas características nas regiões 3320-3271 (ν_{NH}) e 1572-1514 cm^{-1} (ν_{CC}). Para os compostos 1 e 2, foi possível encontrar bandas na região 3132-3121 (ν_{CH}) e 800-771 cm^{-1} (γ_{CH}) e para 2 e 3, observa-se bandas ν_{CH_3} na região 3009-2920 cm^{-1} . As absorções no IV referentes à coordenação do DMSO via átomo de enxofre nos compostos 1-3 localizam-se na região 3012-2920 (ν_{CH_3}); 1092-1015 (ν_{SO}); 721-679 (ν_{C-S}) e 432-428 cm^{-1} (δ_{CSO}).

No espectro de RMN de 1H do composto 1, foi possível encontrar sinais em $\delta 7,91$ (1H,s), $\delta 6,31$ (1H,dd,2Hz), $\delta 7,55$ (1H,s) e $\delta 12,59$ (1H,s) referente aos hidrogênios H-3, H-4, H-5 e N-H do anel

pirazólico, respectivamente e um sinal em $\delta 3,14$ (6H,s) referente aos grupamentos metila do dimetilsulfóxido. A análise dos dados de RMN 1H dos compostos 2 e 3 permitiu evidenciar a presença de isômeros em solução para ambos os compostos. Para os isômeros do composto 2, observa-se sinais na região $\delta 3,76$ -1,69 referentes aos grupos metila do anel pirazólico e do DMSO, dois singletos em $\delta 5,90$ e $\delta 5,83$ referentes ao hidrogênio H-4 do anel pirazólico e dois sinais em $\delta 12,08$ e $\delta 11,16$ atribuídos ao hidrogênio do grupamento N-H do anel pirazólico. Para os isômeros do composto 3, verifica-se a presença de sinais na região $\delta 3,75$ -1,70 referentes aos grupos metila do anel pirazólico e do DMSO.

As bandas presentes nos espectros de reflectância difusa na região do UV-vis dos compostos 1-3 foram atribuídas e encontram-se na Tabela 2.

Tabela 2. Dados de reflectância difusa (nm) e atribuições para os composto 1-3.

Atribuições	1	2	3
MLCT do tipo $d\pi \rightarrow \pi_1$	251,4	254,4	273,9
Transição d-d permitida do tipo $^1A_1 \rightarrow ^1T_2$	303,9	357,8	372,8
Transição d-d permitida do tipo $^1A_1 \rightarrow ^1T_1$	426,8	480,8	590,3
Transição d-d proibida do tipo $^1A_1 \rightarrow ^3T_1$	591,8	593,2	encoberta

Conclusões

A análise dos dados espectroscópicos permitiu inferir sobre as características estruturais dos compostos investigados. Nota-se que mesmo alterando-se a natureza do ligante pirazólico, os compostos finais não sofreram alteração na sua composição. Foi possível observar que a introdução de grupos volumosos no anel pirazólico originou a formação de isômeros em solução.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Capes, CNPq e FAPESP.

¹ Clarke, M. J.; Zhu, F. e Frasca, D. R.. *Chem. Rev.* **1999**, 99, 2511.

² Reisner, E.; Arion, V. B.; Silva, M. F. C. G.; Lichtenecker, R.; Eichinger, A.; Keppler, B. K.; Kukushkin, V. Y. e Pombeiro, A. J. L. *Inorg. Chem.* **2004**, 43, 7083.