

Estrutura Cristalina do [Ru(dppb)(bipy)(L)]SO₄

Jademilson C. Dos Santos¹ (IC), Valéria Rodrigues dos S. Malta¹ (PQ)*, Alzir A. Batista² (PQ), Javier Ellena³ (PQ), Fabio Batista do Nascimento (PG)². e-mail: vrsm@qui.ufal.br

¹ Laboratório de Cristalografia e Modelagem Molecular (LabCrMM), Instituto de Química e Biotecnologia, Universidade Federal de Alagoas (UFAL), CEP 57072-970, Maceió-Al, Brasil.

² Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, C.P. 676, CEP 13565-905, São Carlos (SP), Brasil.

³ Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, CP 369, 13560-970 São Carlos – SP, Brasil

Palavras Chave: Complexos de Rutênio, Difração de Raios X, atividade farmacológica.

Introdução

Muitos complexos de rutênio com estado de oxidação +2 e + 3 tem sido citado na literatura devido sua diversidade de aplicações, principalmente aquelas com potencial farmacológico. Complexos de rutênio contendo átomos de fósforos em sua estrutura são amplamente usados na catálise homogênea, seja pelo envolvimento de reações de transferência de elétrons ou aproveitando a força do ligante para estabilizar o complexo. No entanto, a importância destes compostos não esta limitada ao uso em catálise, pois diversos estudos demonstraram sua importância na atividade antitumorais^{1,2}.

Em razão das suas importantes aplicações os complexos de rutênio contendo ligantes de fósforo em suas estruturas têm sido caracterizado através das mais variadas técnicas instrumentais. A difração de raios X tem sido uma das ferramentas importante na determinação estrutural dos complexos de Rutênio^{1,2}. Neste trabalho será apresentada a estrutura cristalográfica do composto [Ru(dppb)(bipy)(L)]SO₄.

L = CH₃COO

dppb = 1,4-bis(difenilfosfina)butano

bipy = 2,2'-bipiridina

Resultados e Discussão

Os dados coletados da estrutura [Ru(dppb)(bipy)(L)]SO₄ foram obtidos à temperatura de 293K, usando um monocristal com as dimensões 0.08 x 0.02 x 0.01 mm³, montado num difratômetro Kappa CCD da Enraf Nonius. Para a coleta das intensidades utilizou-se a radiação monocromática MoK α (λ = 0.71073). A célula unitária apresentou um sistema cristalino monoclinico com grupo espacial P2₁/n. Os demais dados cristalográficos foram: a=17.5841(4)Å, b=9.5434(2) Å e c = 22.7953(6) Å, Z = 4 moléculas/célula unitária, V =3724.87(15) Å³ e F(000) = 1724. As reflexões coletadas, únicas e R(int), foram de 34798, 7023 e 0.0835, respectivamente. A correção de absorção

foi realizada utilizando o método de Gaussian. A resolução da estrutura foi realizada pelos métodos diretos utilizando o programa SHELX97³ e o modelo foi refinado pela matriz total de mínimos quadrados F². O modelo final demonstrou um índice de discordância de R₁ = 0.0561 [Rall=0.0834].

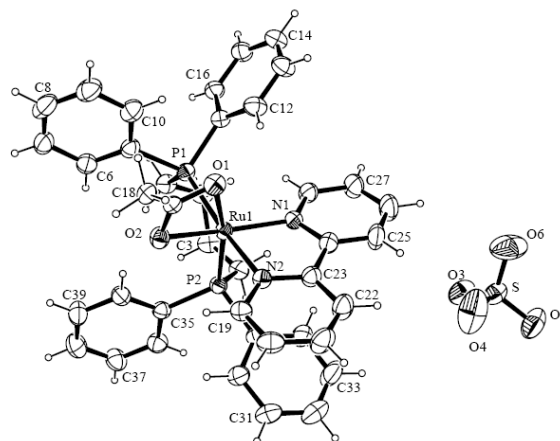


Figure 1 – Representação ORTEP do [Ru(dppb)(bipy)(L)]SO₄

Conclusões

Os resultados apresentados neste trabalho mostraram que o complexo [Ru(dppb)(bipy)(L)]SO₄ apresentou as distâncias e ângulos interatômicos de acordo com os valores normais e esperados para estes tipos de ligações descritos na literatura. O modelo final obtido apresentou um fator de discordância de 0.0561.

Agradecimentos

CNPq UFSCar IFSC-USP UFAL FAPESP

¹Beraldo, H. et al. *Spectroc. Acta Part A*. **2008**, 69,1073-1076.

²Ye, B. H.; Chen, X. M.; Zeng, T. X. e Ji, L. N. *Inorg. Chim. Acta*. **1995**, 240, 5-11.

³Sheldrick, G.M. (1997). SHELX97 Program for the Solution and Refinement of Crystal Structures. University of Göttingen. Germany