

Estrutura Cristalina do $\text{RuCl}_3(\text{NO})(\text{PPh}_3)(4\text{-CNpy})$

Lucas Emanuel do N. Aquino (IC)¹, Valéria R. dos Santos Malta (PQ)^{1*}, Alzir Azevedo Batista(PQ)²
 Fabio Batista do Nascimento (PG)², Javier Ellena (PQ)³. email: vrsm@qui.ufal.br

¹ Laboratório de Cristalografia e Modelagem Molecular (LabCrMM), Instituto de Química e Biotecnologia, Universidade Federal de Alagoas (UFAL), Campus A.C.Simões, Br 104-Norte, Km 97, Tabuleiro dos Martins CEP 57072-970, Maceió-Al, Brasil

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

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

Palavras Chave: complexos de rutênio, resolução estrutural, difração de raios X, dados cristalográficos.

Introdução

Os complexos de rutênio são bastante conhecidos por suas propriedades medicinais. Diversos grupos de pesquisa se encarregam do estudo desses compostos, tendo em vista suas propriedades antitumorais, num possível tratamento do câncer. Complexos de rutênio contendo NO, em especial, têm recebido muita atenção, não só na busca de um possível tratamento do câncer, mas também devido aos aspectos biológicos e à liberação controlada de NO⁽¹⁾, característica muito interessante tendo-se em vista o potencial terapêutico do NO no tratamento de problemas cardiovasculares, tais como o ataque cardíaco⁽²⁾, uma vez que o mesmo promove a dilatação de veias e artérias, facilitando a circulação sanguínea. Esse fato despertou o interesse quanto aos aspectos estruturais desse tipo de composto. Com o objetivo de obter tais dados utilizou-se a técnica de difração de raios X por um monocristal por meio de um difratômetro automático Kappa CCD⁽³⁾.

Resultados e Discussão

Os principais parâmetros cristalinos da célula unitária, bem como outros dados relevantes obtidos na resolução estrutural são: T = 298K, Radiação (MoK α) = 0.71073 Å, sistema cristalino triclinico, grupo espacial $P\bar{1}$, a = 9.0839(2) Å, b = 10.2843(3) Å, c = 14.0931(3) Å; α = 99.148(2)°, β = 96.133(2)°, γ = 107.6410(10)°; Volume = 1221.80(5) Å³; Z = 2 e F(000) = 604; R(obs) = 0.0382 e S = 1.065. Foram coletadas 5011 reflexões independentes com R(int) = 0.0238. A estrutura cristalina foi resolvida por métodos diretos e refinada pelo método dos mínimos quadrados⁽³⁾, com matriz completa de F².

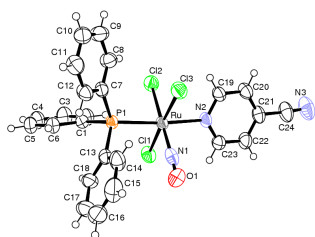


Figura 1. Representação ORTEP do $\text{RuCl}_3(\text{NO})\text{P}(\text{Ph})_3(4\text{-CNpy})$.

32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Conclusões

Na estrutura o íon metálico adota uma geometria octaédrica distorcida e o grupo nitrosil (NO) é essencialmente linear e possui um posicionamento trans em relação ao íon Cl2 [N1 – Ru – Cl2 = 175,88°]. Analisando o empacotamento cristalino, verifica-se que as moléculas são mantidas no retículo cristalino através de interações secundárias que apresentam os seguintes valores: C17 – H17...N3⁽ⁱ⁾ [C17 – H17 = 0,930(5) Å ; C17...N3 = 3,570(7) Å ; H17...N3 = 2,738(4) Å; C17 – H17...N3 = 149,4(3)°], C11 – H11...N3⁽ⁱⁱ⁾ [C11 – H11 = 0,930(3) Å, C11 ...N3 = 3,531(5) Å, H11...N3 = 2,693(4) Å, C11 – H11...N3 = 150,3(2)°] C3-H3...Cl1⁽ⁱⁱⁱ⁾ [C3-H3 = 0,930(4) Å, C3 ...Cl1 = 3,764(4) Å, H3...Cl1 = 2,934(1) Å, C3-H3...Cl1 = 149,4(3)°] C15-H15...C9^(iv) [C15-H15 = 0,930(4) Å, C15...C9 = 3,661(5) Å, H15...C9 = 2,850(4) Å, C3-H3 ...Cl1⁽ⁱⁱⁱ⁾ = 146,2(3)°]. {(i) -x+1,-y+1,-z, (ii) x+1,+y,+z+1, (iii) -x+1,-y,-z, (iv) -x+1,-y+1,-z+1}.

Tabela 1 – Distância e ângulos selecionados para o composto $\text{RuCl}_3(\text{NO})(\text{PPh}_3)(4\text{-CNpy})$ (1) e o *fac*- $[\text{RuCl}_3(\text{NO})(\text{dppm})]$ (2)⁽⁴⁾

	1	2
Ru-N(1)	1.805(4) Å	1,787(6) Å
Ru-Cl(2)	2.3338(9) Å	2,3584(12) Å
Ru-P(1)	2.3863(8) Å	2,3488(12) Å
N(1)-O(1)	1.032(4) Å	1,029(6) Å
O1- N1 - Ru	174,2(3)°	178,7(6)°
N1 – Ru – P1	93,11(9)°	93,27(4)°

O composto (2) possui uma estrutura semelhante ao composto (1). Comparando as distâncias e ângulos interatômicos selecionados, observa-se que tais dados estão de acordo.

Agradecimentos

CNPq UFSCar IFSC-USP UFAL FAPESP

¹Poelhsitz, G. V.; Batista, A. A.; Araujo, M. P. et al; *Inorg. Chem. Comm.* **2007**, 10, 133.

²Ford, P.C e Lorkovic, I.M., *Chem. Rev.* **2002**, 102, 993

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

⁴Poelhsitz, G. V.; Lima, R. C.; Batista, A. A. et al, *Inorg. Chim. Acta* **2006**, 305, 2896-2909.