

## Síntese, cristalquímica e estudo biológico do complexo trans-bis(2-benzofenonato- $\kappa$ O,O')paládio(II)

Iara M. L. Rosa (PG)\*, Alexandre O. Legendre (PQ), Elba G. Pereira (PG), Eduardo T. Almeida (PQ), Antonio C. Doriguetto (PQ) [iara\\_landre@yahoo.com.br](mailto:iara_landre@yahoo.com.br)

Instituto de Ciências Exatas, Laboratório de Cristalografia, Universidade Federal de Alfenas

Palavras Chave: difração de raios X, estrutura cristalina, complexo de paládio

### Introdução

Complexos de paládio são compostos de grande interesse nas áreas de Química Medicinal e Bioinorgânica, e Catálise<sup>1</sup>. Benzofenonas polihidroxiladas são particularmente conhecidas devido à sua absorção na região do UV sendo assim potenciais filtros solares<sup>2</sup>. Esses relatos motivaram-nos a estudar complexos de Pd(II) com benzofenonas poli-hidroxiladas. Neste trabalho reportamos a síntese, cristalquímica e o estudo biológico do complexo trans-bis(2-benzofenonato- $\kappa$ O,O')paládio(II).

### Resultados e Discussão

O complexo trans-bis(2-benzofenonato- $\kappa$ O,O')paládio(II) foi sintetizado utilizando uma rota sintética similar à metodologia de Parshall<sup>3</sup>, tendo como precursor da síntese o complexo  $\text{Li}_2[\text{PdCl}_4]$ . A reação foi feita em meio metanólico com uma estequiometria 1:1 (ligante:metal) utilizando 3 mmol de  $\text{PdCl}_2$  e 2-hidroxibenzofenona. O produto obtido foi caracterizado por análise termogravimétrica (TG), calorimetria diferencial de varredura (DSC) e espectroscopia vibracional na região do infravermelho (IV), confirmando a coordenação do metal. Cristais amarelos de hábito paralelepípedo foram obtidos a partir da lenta evaporação do solvente (diclorometano/clorofórmio). As análises de difração de raios X de monocristal foram realizadas a 150 K, com radiação  $\text{CuK}\alpha$  ( $\gamma = 1,5418 \text{ \AA}$ ) utilizando o difratômetro Oxford-Diffraction GEMINI. Os principais dados cristalográficos e a representação Ortep do complexo estão apresentados na Tabela 1 e Figura 1, respectivamente. A análise da estrutura molecular apontou a formação de um complexo quadrado planar, estando o átomo de paládio exatamente no plano formado pelos átomos de oxigênio, devido a sua posição coincidir com o centro de inversão cristalográfico. O ângulo entre os planos dos dois anéis é de  $65,34(2)^\circ$  para o complexo, enquanto que para a estrutura do ligante<sup>4</sup> é de  $52,84(1)^\circ$ . A ligação C(2) – O(1) tem comprimento igual a  $1,308(6) \text{ \AA}$  para o complexo e  $1,350(5) \text{ \AA}$  para o ligante, sendo neste alongada devido a presença de uma ligação de hidrogênio intramolecular forte, que é perdida com a coordenação do metal ao grupo. A estrutura

34ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

cristalina deste complexo não apresenta ligações de hidrogênio intra e intermoleculares, sendo o empacotamento estabilizado por interações fracas de Van der Waals.

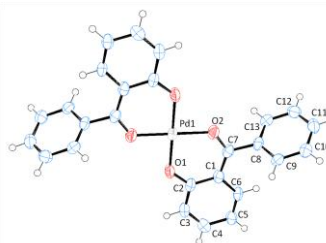


Figura 1. Representação Ortep do complexo bis-2-benzofenonato paládio (II).

Tabela 1. Principais dados cristalográficos.

G. Espacial / Sist. Cristalino	C2/c, Monoclínico
Parâm. cela	a=19,155(5) Å, b=5,644(5) Å, c=20,050(5) Å, $\beta=115,614(5)^\circ$
Vol.	1954,6(2) Å <sup>3</sup>
Z/Z'	4/0,5

Testes antimicrobianos foram realizados neste composto, bem como em seu ligante puro, não apresentando atividade antifúngica e antibiótica. Testes anti-tumorais serão realizados em etapas futuras.

### Conclusões

O complexo trans-bis(2-benzofenonato- $\kappa$ O,O')paládio(II) foi sintetizado e sua estrutura determinada. Suas geometrias intra e intermoleculares foram estudadas e comparadas em termos de efeitos estéricos e indutivos. Os estudos biológicos não apontaram atividade sobre fungos e bactérias, no entanto testes anti-tumorais ainda serão realizados.

### Agradecimentos

FAPEMIG, CNPq, PIBIC-Unifal-MG, CAPES FINEP pelo apoio financeiro e o LabCri (UFMG) pelas medidas de DRX.

<sup>1</sup>Barachevskii, V. A.; Peshkov, G. I. and Tsekhomskii, V. A. *Fotokhromizm i ego primeneniye (Photochromism and its Applications)*, Moscow: Khimiya, 1977.

<sup>2</sup>Cox, P. J., Kachagias, D; Kelly, O., *Acta Cryst. B*, 2008, 64, 206-216.

<sup>3</sup>Parshall, G. W. *Acc. Chem. Res.*, 1970, 3, 139

<sup>4</sup>Schlemper, E. O. *Acta Cryst. B*, 1982, 38, 1619-1622.