

# Estudos eletroquímicos dos complexos de rutênio do tipo *cis*-[Ru(phen)<sub>2</sub>(Im)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup>.

Carolina R. Cardoso<sup>1</sup>(PG)\*, Miriam N. Numajiri<sup>1</sup>(IC), Rose M. Carlos<sup>1</sup>(PQ)

\*carolinariverin@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, Rodovia Washington Luís, km 235 - SP-310 São Carlos - São Paulo - Brasil.

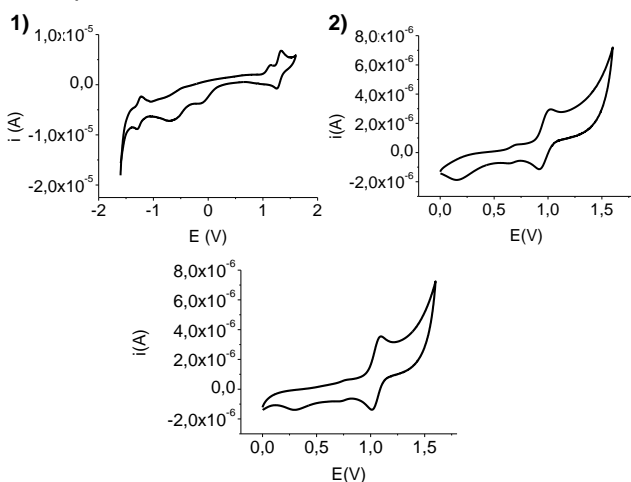
Palavras Chave: Complexos de rutênio, voltametria cíclica, espectroeletroquímica, calculo teórico.

## Introdução

O imidazol está presente em várias moléculas de importância biológica e tem sido utilizado na indústria farmacêutica devido a atividade anti-viral, anti-câncer, anti-inflamatório entre outros<sup>1</sup>. O estudo de complexos de rutênio com ligantes imidazólicos são de grande interesse e poderão ser no futuro bons candidatos a fármacos.

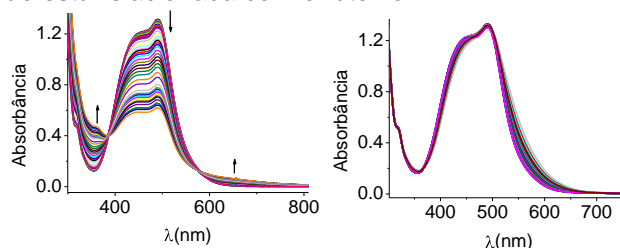
## Resultados e Discussão

O voltamograma cíclico dos complexos *cis*-[Ru(phen)<sub>2</sub>(ImH)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> (1), *cis*-[Ru(phen)<sub>2</sub>(1MeImH)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> (2) e *cis*-[Ru(phen)<sub>2</sub>(4MeImH)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> (3) são caracterizados por um processo oxidativo reversível em 0,77V e 0,71V (complexo 2,3) e um processo irreversível em 1,15V para o complexo 1. Todos apresentam um par redox reversível atribuído ao centro metálico de Ru(I/III). A localização destes processos são dependentes das propriedades σ doadoras dos ligantes imidazólicos confirmando que o processo oxidativo é atribuído ao ligante imidazol e não a desprotonação deste ligante. Na região de potenciais negativos além das reduções características do ligante fenantrolina também é visto uma redução do ligante imidazol para o complexo 1.



**Figura 1.** Voltametria cíclica dos complexos 1, 2 e 3  $1 \times 10^{-3}$  M em DMF com PTBA 0,1M como eletrólito de suporte, na velocidade de 100mV/s.

Os estudos espectroeletroquímicos acompanhados por UV-Vis do complexo 1 quando aplicado um potencial de 1,32 V levam ao consumo da banda de MLCT (Ru dπ – phen π\*). Estes processos são reversíveis. Quando aplicado potencial de 0,80V não observa-se alterações significativas no espectro de absorção do complexo indicando que esta oxidação não está relacionada com o rutênio.



**Figura 3.** Espectroeletroquímica do complexo 1 em DMF com PTBA 0,1 M como eletrólito de suporte.

Os cálculos computacionais (DFT B3LYP/LanL2DZ) mostraram uma grande porcentagem de rutênio no HOMO e fenantrolina no LUMO. Análise de carga por NBO mostram rutênio positivo e a carga negativa distribuída igualmente sobre os ligantes fenantrolina e imidazol corroborando os dados eletroquímicos.

Tabela 1. Valores de carga parcial por NBO do complexo 1.

átomo	carga
Ru	0,620
N(phen)	-0,465
N(imidazol)	-0,537

## Conclusões

Estes dados são relevantes uma vez que muitos dos processos biológicos ocorrem com transferência de elétrons entre as moléculas bioativas.

## Agradecimentos

A CAPES e FAPESP pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> Narasimhan, B.; Sharma, D.; Kumar, P., Med. Chem Res.. 2010, 53.