

# Síntese, Caracterização e Análise Estrutural de um Novo Complexo de Paládio(II) com uma Tiossemicarbazona

João Guilherme M. de Carvalho (IC)<sup>1\*</sup>, Claudia Cristina Gatto (PQ)<sup>1</sup>

\*meta\_joao@hotmail.com

<sup>1</sup>Laboratório de Síntese Inorgânica e Cristalografia – Instituto de Química – Universidade de Brasília, Brasília/DF

Palavras Chave: Difração de Raios X de Monocristal, Tiossemicarbazonas, Complexos de Paládio(II)

## Introdução

Tiossemicarbazonas possuem significativa atividade biológica, atuando como antivirais, antibacterianos e antitumorais.<sup>1</sup> Seus complexos metálicos também apresentam potencial farmacológico, tendo muitas vezes efeitos superiores aos observados àqueles apresentados pelos ligantes não coordenados.<sup>2,3</sup>

Estudos anteriores mostraram que complexos de paládio(II) com tiossemicarbazonas são ativos contra a proliferação de câncer de mama, incluindo linhagens de células tumorais resistentes à cisplatina. Além disso, esses complexos de paládio(II) tem apresentado bons efeitos anti-tuberculose.<sup>3</sup>

## Resultados e Discussão

Este trabalho consiste na síntese e caracterização de um novo complexo de paládio(II) com um agente complexante da classe das tiossemicarbazonas. O complexo obtido, [Pd(apptsz)Cl] representado na Figura 1, apresenta-se na forma neutra, pois o ligante encontra-se desprotonado e atua de forma tridentada, coordenando-se ao átomo de paládio pelos átomos de nitrogênio piridínico e azometínico e pelo átomo de enxofre. A esfera de coordenação do átomo de paládio é completada por um íon cloreto.

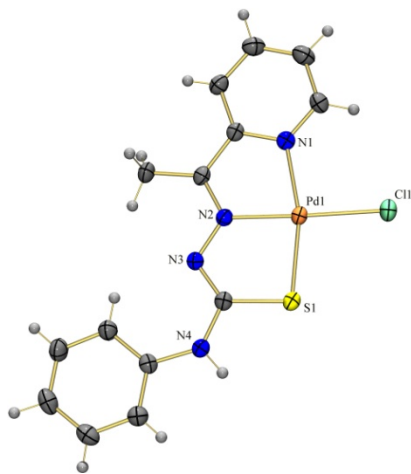


Figura 1. Projeção da estrutura cristalina e molecular do complexo [Pd(apptsz)Cl].

O átomo de paládio(II) assume uma geometria quadrado planar distorcida, devido a geometria do ligante e favorecida devido à sua configuração eletrônica  $d^8$ .

Os dados da análise por difração de raios X foram coletados em um difratômetro Brucker CCD Smart APEX II e podem ser observados na Tabela 1.

Tabela 1. Dados cristalográficos para o composto [Pd(apptsz)Cl].

|                    |  |
|--------------------|--|
| Fórmula            | C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> ClN <sub>4</sub> PdS |
| Massa Molar        | 411,19 g·mol <sup>-1</sup>                           |
| Sistema Cristalino | Triclínico   |
| Grupo Espacial     | $P\bar{1}$   |
| a (Å)              | 7,179(4)   |
| b (Å)              | 8,419(4)   |
| c (Å)              | 13,3398(7)   |
| $\alpha$ (°)       | 92,101(3)  |
| $\beta$ (°)        | 96,704(4)  |
| $\gamma$ (°)       | 110,167(3)   |
| Z                  | 2  |
| $R_1 / wR_2$       | 0,0277/0,0579  |

## Conclusões

A síntese e caracterização estrutural do novo complexo de paládio(II) contribui não só para a compreensão da química de coordenação deste elemento, como também para futuros estudos bioinorgânicos relacionados às atividades antitumoral e anti-tuberculose deste novo complexo de paládio(II).

A afinidade do paládio por bases de Schiff que apresentam sítios de coordenação sulfurados continuarão a ser exploradas tentando potencializar sua atividade biológica.

## Agradecimentos

CNPq, FAPDF e FINATEC

<sup>1</sup> Kovala-Demertzi, D., Demertzi, M., Yadav, P.N., Castiñeiras, A., West, D.X., *Transition metal chemistry*. **1999**, 24, 642.

<sup>2</sup> Ferraz, K.S.O., Ferandes, L., Carrilho, D., Pinto, M.C.X. Leite, M.F., Souza-Fagundes, E.M., Nivaldo L. Speziali, N.L., Mendes, I.C., Beraldo, H., *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. **2009**, 17, 7138.

<sup>3</sup> Maia, P.I.S., Graminha, A., Pavan, F.R., Leite, C.Q.F., Batista, A.A., Back, D.F., Lang, E.S., Ellena, J., Lemos, S.S., Salistre-de-Araujo, H.S., Deflon, V.M., *J. Braz. Chem. Soc.*. **2010**, 21, 1177.