INVESTIGAÇÃO DFT SOBRE O COMPLEXO DICLORO-BISFOSFINA-RU-ARENO NAS FORMAS ANIÔNICA, CATIÔNICA E NEUTRA

Magno Roger Antonichen (PROVIC), Sergio Ricardo de Lazaro (Orientador), e-mail: srlazaro@uepg.br

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Química.

Química; físico-química; química teórica.

Palavras-Chave: *Química Computacional, complexo inorgânico, atividade anticâncer, DFT, Ru-areno.*

Resumo

Os tratamentos para câncer são muito investigados atualmente e a pesquisa sobre o uso de complexos inorgânicos do tipo Ru-areno é uma linha em potencial porque apresenta propriedades mimetizadoras do Ru em relação ao Fe no organismo possibilitando menor toxicidade em relação aos outros metais de transição. É conhecido que existe a necessidade de modificação do estado de oxidação do Ru para a ação no organismo. Para isso, a simulação da estrutura molecular usando a DFT é uma ferramenta avançada para investigar a transferência de carga metal-ligante por meio dos orbitais de fronteira HOMO e LUMO.

Introdução

O único método utilizado para o tratamento de câncer é baseado em complexos de Platina. Os complexos de Rutênio mostraram atividade antitumoral necessitando de investigações sobre os efeitos no ambiente biológico do organismo humano. A investigação das mudanças de carga total da estrutura do dicloro-bisfosfina-Ru-areno (Figura 1) mostram as perturbações sobre as ligações químicas nesses modelos. As modulações sobre os orbitais HOMO e LUMO são um ponto fundamental de como a atividade química deste complexo inorgânico pode ser alterada.[1,2]

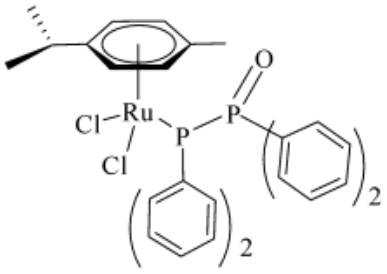


Figura 1. Estrutura molecular do complexo dicloro-bisfosfina-Ru(II)-areno, um biomimetizador de Fe.

Material e Métodos

O modelo da estrutura do complexo de Ru (II) foi construído usando o programa Gauss View. O programa GAUSSIAN09 foi utilizado para simular as estruturas com o funcional B3LYP com os conjuntos de base do tipo Gaussianas 6-31+G(d) para os átomos de C, H, N e Cl; enquanto, para o Ru foi utilizado o conjunto de base do tipo contraída dupla zeta desenvolvido por Sapporo (SPK-DZCD).

Resultados e Discussão

A simulação do modelo em carga neutra apresentou distâncias semelhantes entre o átomo de Ru e seus ligantes. A distância de ligação entre Ru-cimeno foi de 2,297 Å, a ligação entre Ru-Cl foram de 2,475 Å e 2,494 Å e a distância Ru-P 2,475 Å. Esses resultados representam de forma muito satisfatória a geometria molecular com carga neutra por meio das ligações químicas alcançando alta qualidade e contribuindo para o posterior entendimento da transferência de carga entre os grupos ligantes e o Rutênio, importante para a atividade anticancerígena. O orbital HOMO está distribuído entre o átomo de Ru(II) e todos os ligantes do complexo. O orbital LUMO indica um deslocamento de carga de um grupo cloreto para o grupo bisfosfina. O complexo de Ru (II) possui massa molecular de 692,05 u.m.a. ou 628,62 g mol^{-1} com energia vibracional de ponto zero de 1566,0 kJ mol^{-1} ou 374,3 kcal mol^{-1}, a energia de ionização calculada foi de 535,60 kJ mol^{-1} ou 128,01 kcal mol^{-1} e a energia de afinidade eletrônica foi calculada como -199,54 kJ mol^{-1} ou -47,69 kcal mol^{-1} . A simulação das frequências vibracionais foi bem-sucedida confirmando que a geometria molecular calculada é um ponto de mínimo real e bem determinado.

Conclusão ou Conclusões

A simulação foi bem-sucedida mostrando a transferência de carga entre os grupos ligantes Cloro e cimeno através do átomo de Ru(II).

Agradecimentos

Agradecimento ao CNPq, UEPG e ao grupo de pesquisa GSQ.

[1] PETRUK, G. et al. Encapsulation of the Dinuclear Trithiolato- Bridged Arene Ruthenium Complex Diruthenium- 1 in an Apoferritin Nanocage: Structure and Cytotoxicity. ChemMedChem, v. 14, n.5, p. 594-602, 2019.

[2] BERG, C. et al. Modulation of the solubility properties of arene ruthenium complexes bearing stannyl ligands as potential anti-cancer agents. Journal of organometallic chemistry, v. 891, p. 12-19, 2019.