

DETERMINAÇÃO DA ESTRUTURA CRISTALINA E MOLECULAR DE {Pd (C², N-dmpa)(N₃)₂(μ-dppe)}

Milene Ap Rodrigues de Oliveira^a, Maria Teresa P Gambardella^a e Antonio Carlos F Caíres^b

^aInstituto de Química, USP, São Carlos, Brasil

^bCentro Interdisciplinar de Investigação Bioquímica, Universidade de Mogi das Cruzes, Mogi das Cruzes, Brasil

Uma das estratégias básicas no desenvolvimento de novas drogas antitumorais a base de metais de transição consiste na síntese de complexos que, mesmo possuindo características estruturais similares a da carboplatina ou da cisplatina, sejam capazes de provocar lesões diferentes e irreversíveis na molécula de DNA. No que concerne aos complexos de paládio, observa-se que os mesmos, em geral, possuem atividade antitumoral muito pequena quando comparados aos complexos de platina, devendo-se isto a alta labilidade exibida pelos compostos de paládio (II) em meio biológico^[1].

Os principais dados cristalográficos para o composto {Pd (C², N-dmpa)(N₃)₂(μ-dppe)} e as condições de refinamento encontram-se na Tabela I. A estrutura foi resolvida no sistema WinGX^[2] e refinada pelo SHELXL^[3].

Na estrutura cada átomo de paládio está ligado a dois átomos de N sendo um da azida (Pd1-N1A 2,111(1); Pd2-N1B 2,107(1) Å) e outro do grupo fenetilamina (Pd1-N4A 2,144(7) Pd2-N4B 2,146(7) Å); a um átomo de carbono (Pd1-C6 2,028(8); Pd2-C37 2,026(8) Å); e a um átomo de fósforo do ligante difenilfosfina (Pd1-P1 2,254(2); Pd2-P2 2,245(2) Å). A representação gráfica ORTEP^[4] pode ser observada na da Figura I, onde os átomos estão identificados.

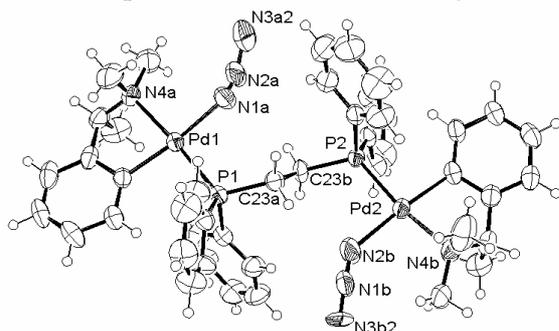


Figura I – Representação ORTEP

Observando-se os ângulos de coordenação do composto estudado, verifica-se que o paládio apresenta geometria quadrada planar, como esperado.

Pelos valores de distâncias e ângulos de ligação encontrados pode-se concluir que a estrutura estudada neste trabalho está de perfeito acordo com os valores da literatura, não havendo assim nenhuma distorção significativa.

Tabela I-Resumo dos principais dados cristalográficos

Fórmula molecular	C ₄₆ H ₅₂ N ₈ P ₂ Pd ₂
Sistema cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	P2 ₁
a (Å)	8,4196(1)
b (Å)	23,612(3)
c (Å)	11,647(1)
β (°)	100,925(1)
Z (moléculas por cela unitária)	4
Número de reflexões coletadas	7172
Número de reflexões únicas	6765
N ^o de reflexões com I ≥ 2 σ(I)	3821
Rint	0,044
R / wR (I ≥ 2 σ(I))	0,047/ 0,086
R / wR (all)	0,150/ 0,107
S	0,994

[1]Caíres, A.C.F; Almeida, E.T; Mauro, A.E; Hemerly, J.P; Valentini,S.R, *Química Nova*; v.22 n.3; São Paulo;1999.

[2] FARRUGIA, L.J. WinGX: A Windows Program for Crystal Structure Analysis. Scotland, University Os Glasgow, 1999. [Programa de Computador].

[3] SHELDRICK, G.M. SHELXL97: Program for the Refinement of Crystal Structures. Germany, University of Göttingen, 1997. [Program de Computador]

[4] FARRUGIA, L.J. ORTEP3 for Windows. J. Appl. Cryst., v.30, p.565-569, 1997.