

DETERMINAÇÃO DA ESTRUTURA CRISTALINA E MOLECULAR DE $\{[\text{Pd}(\text{CH}_2\text{-N}(\text{CH}_3)_2)(\text{Cl})\text{C}=\text{C}(\text{Ph})](\mu\text{-Cl})_2\}$

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

Existe um grande interesse no desenvolvimento de novos agentes quimioterápicos a base de metais de transição, especialmente de metais pertencentes ao grupo da platina, que sejam menos tóxicos e, ou possuam um espectro de atividade antitumoral mais amplo^[1].

Os compostos ciclopaladados tem despertado um recente e grande interesse na aplicação dos mesmos como agentes antineoplásicos, não só por produzirem complexos estáveis o suficiente para permitirem uma eficaz ação da droga no organismo em concentrações muito baixas, mas também por possuírem uma citotoxicidade consideravelmente menor que os compostos análogos de platina^[1].

Os principais dados cristalográficos para o composto $\{[\text{Pd}(\text{CH}_2\text{-N}(\text{CH}_3)_2)(\text{Cl})\text{C}=\text{C}(\text{Ph})](\mu\text{-Cl})_2\}$ e as condições de refinamento encontram-se na Tabela I. A estrutura foi resolvida no sistema WinGX^[2] e refinada pelo SHELXL^[3].

A molécula encontra-se em posição especial, em torno de um centro de inversão, e cada átomo de paládio está ligado a um átomo de carbono [Pd-C7 1,993(6)Å], a um átomo de nitrogênio [Pd-N 2,068(5) Å] e a um átomo de cloro e o ao seu simétrico [Pd-Cl 2,338(2)Å e Pd-Cl1 2,460(1)Å]. A representação gráfica ORTEP^[4] pode ser observada na da Figura I, onde os átomos estão identificados.

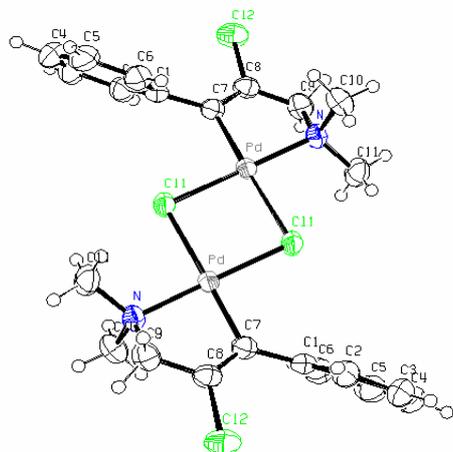


Figura I – Representação ORTEP

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

Fórmula molecular	C ₂₂ H ₂₆ Cl ₄ N ₂ Pd ₂
Sistema cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	P2 ₁ /a
a (Å)	12,0947(2)
b (Å)	8,3051(5)
c (Å)	13,0525(1)
β (°)	108,926(1)
Z (moléculas por cela unitária)	2
Número de reflexões coletadas	3762
Número de reflexões únicas	3602
N ^o de reflexões com I ≥ 2 σ(I)	2704
Rint	0,022
R / wR (I ≥ 2 σ(I))	0,029/ 0,064
R / wR (all)	0,055/ 0,072
S	1,029

[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.

Agradecimentos: Capes