

Determinação estrutural de complexo Rutênio via difração de raio-X

Palavras Chave: Raio-x, Cristal, Rutênio.

Introdução

O presente trabalho propõe a determinação estrutural utilizando a difração de raios X, cálculos teóricos de natureza quântica (semi-empíricos e DFT) de propriedades físico-químicas, bem como o estudo das interações moleculares encontradas em complexos de rutênio a partir dos resultados obtidos.

O complexo de Rutênio foi sintetizado pelo grupo do Prof. Dr. Alzir Batista do Instituto de Química da Universidade Federal de São Carlos-UFSCar; a obtenção da estrutura molecular através da difração de raios-X foi realizada no Laboratório de: Bio processos, Cristalografia e Modelagem Molecular - LaBioCriMM/UFAL.

Formula empírica	Ru Cl ₂ S P ₂ C ₂₈ H ₂₈
Sistema Cristalino	Monocíclico
Densidade	1.452 mg/m ³
Volume	5769.3(4) Å ³
Dimensões da célula unitária	a = 15.3237(7) Å b = 20.6134(9) Å c = 18.4211(5) Å

Material e Métodos

Foram utilizados dois softwares computacionais para a determinação estrutural do cristal de rutênio: WinGx e Otep.

O WinGx, que é um sistema de programas MS-Windows para resolver, refinar e analisar dados de difração de raios-X de cristal único para pequenas moléculas.

Outro sistema usado foi o Ortep que é um sistema gráfico que incorpora as informações de extensão .res do WinGx e atribui dados de eletrosfera dos átomos da estrutura em termos de ressonância (BARBOSA, 2017).

Tabela 1. Dados da estrutura Cristalina (Autor, 2021)

Conclusões

Em função dos comprimentos de onda, da Lei de Bragg sobre a difração de raio-x, é possível fazer estudos a nível atômicos sobre moléculas. O que se faz necessário profissionais com técnicas de modelagem para este fins, com os resultados já citados fica bem expresso a eficiência e a relevância pois se consegue um modelo cristalográfico satisfatório para estudos posteriores.

Resultados e Discussão

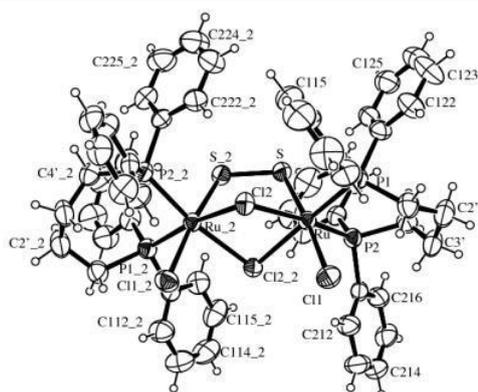


Figura 1. Estrutura de rutênio após o processo de refino da estrutura, com o erro de aproximadamente 4% em comparação com a estrutura real (Autor, 2021).

Após a modelagem molecular é possível obter várias informações físico-químicas das estruturas, como segue algumas na tabela a baixo:

Agradecimentos

UFSCar, pelo complexo de Rutênio.

LabioCriMM/UFAL pelo treinamento com as técnicas de cristalografia.

BARBOSA, M. I. F. et al. Structural isomerism of Ru(II)-carbonyl complexes: synthesis, characterization and their antitrypanosomal activities. *New Journal of Chemistry*, v. 41, p. 4468-4477, 2017. Disponível em: <<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/nj/c7nj00125h#>>. Acesso em: 15 set. 2017.