

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE QUÍMICA E BIOTECNOLOGIA
BACHARELADO EM QUÍMICA

JÔNATAS LEONCIO PEREIRA LIMEIRA

**DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DE DOIS
COMPOSTOS DE RUTÊNIO COMPLEXADOS COM OS LIGANTES 2,2-
BIPIRIDINA E 1,3-BIS(DIFENILFOSFINO)BUTANO**

Maceió-AL

2023

JÔNATAS LEONCIO PEREIRA LIMEIRA

**DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DE DOIS
COMPOSTOS DE RUTÊNIO COMPLEXADOS COM OS LIGANTES 2,2-
BIPIRIDINA E 1,3-BIS(DIFENILFOSFINO)BUTANO**

Trabalho de conclusão de curso
apresentado ao Instituto de Química e
Biotecnologia da Universidade Federal de
Alagoas, como requisito para obtenção do
grau de bacharel em Química.

Orientadora: Profa. Dra. Valéria
Rodrigues dos Santos Malta

Maceió-AL

2023

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecária: Taciana Sousa dos Santos – CRB-4 – 2062

L733d Limeira, Jônatas Leoncio Pereira.

Determinação estrutural por difração de raios-x de dois compostos de rutênio complexados com os ligantes 2,2-bipiridina e 1,3-bis (difenílfosfina) butano / Jônatas Leoncio Pereira Limeira. - 2023.
30 f. : il. color.

Orientadora: Valéria Rodrigues dos Santos Malta.

Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso em Química: Bacharelado) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Química e Biotecnologia. Maceió, 2023.

Bibliografia: f. 29-30.

1. Cristais. 2. Determinação estrutural. 3. Difração. 4. Raios – X. 5. Complexos de rutênio. I. Título

CDU: 543.44

Folha de Aprovação

JÔNATAS LEONCIO PEREIRA LIMEIRA

DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DE
DOIS COMPOSTOS DE RUTÊNIO COMPLEXADOS COM OS
LIGANTES 2,2- BIPIRIDINA E 1,3-BIS(DIFENILFOSFINO)BUTANO

Trabalho de Conclusão de Curso submetido
à banca examinadora do curso de Química
Bacharelado da Universidade Federal de
Alagoas e aprovada em 15 de agosto de
2023.

Documento assinado digitalmente
 VALERIA RODRIGUES DOS SANTOS MALTA
Data: 16/08/2023 18:16:22-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Orientadora – Profa. Dra. Valéria Rodrigues dos Santos
Malta

Banca examinadora:

Documento assinado digitalmente
 TATIANE LUCIANO BALLIANO
Data: 16/08/2023 19:56:46-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Examinadora Interna – Profa. Dra. Tatiane Luciano Balliano

Documento assinado digitalmente
 GIVANILDO SANTOS DA SILVA
Data: 16/08/2023 18:34:09-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Examinador Externo – Prof. Dr. Givanildo Santos da Silva

AGRADECIMENTOS

A Deus pela minha vida, dando-me a condição e capacidade de poder cursar e concluir esta graduação com êxito e perseverança. Nos momentos de embates, dificuldades e aflições, sempre foi presente a me fortalecer e tornando-me capaz de superar e avançar sobre qualquer obstáculo que surgiu.

À minha Orientadora, Professora Dra. Valéria Rodrigues, por toda paciência, assistência, solicitude e, acima de tudo, pela oportunidade que me foi dada quando me acolheu para a Iniciação Científica, por meio da qual concluo esta graduação. Foi bastante enriquecedor e gratificante todo conhecimento adquirido sob sua orientação.

Ao meu grande amigo-irmão de curso que a Universidade me deu, José Walber de Araújo Cerqueira da Silva, por todo apoio, força, repartir seu conhecimento nos momentos de estudos e afazeres do curso, sempre solícito e paciente, ajudando-me a entregar o meu melhor, também pelas diversões e momentos de descontração, tornando menos exaustivo o cotidiano universitário.

Ao meu Orientador e minha colaboradora da Iniciação Tecnológica, Professor Dr. João Soletti e Larissa Arruda, pela oportunidade entregue a mim, pela repartição de conhecimento durante todo aquele período, sempre prestando todo auxílio necessário, grato por toda paciência e solicitude.

Aos meus pais, Martides Pereira e Leoncio Limeira, por todo auxílio que foi necessário para que eu pudesse estar na Universidade, concedendo todo conforto, apoio e sempre me fortalecendo e instruindo, procurando extrair o meu melhor. Como também, as minhas irmãs, Marianni Limeira e Marielli Limeira, por todo apoio e confiança. Minha família, minha inspiração.

A todos os demais colegas de curso, de pesquisa, professores, técnicos e servidores que de forma direta ou indireta, contribuíram para o meu crescimento pessoal e profissional, durante toda esta graduação.

Por fim, à Universidade Federal de Alagoas, pela disponibilidade de vaga do curso, por todas as oportunidades concedidas: monitorias, pesquisas, eventos, cursos, entre outros. Todo auxílio necessário para o avanço no que refere aos conhecimentos científicos e profissionais.

"É de loucos fazer o mesmo uma e outra vez, esperando obter resultados diferentes. Se você está procurando resultados diferentes, não continue fazendo o mesmo."

Albert Einstein.

RESUMO

Numerosos cristais de rutênio (II) com ligantes π -insaturados, como piridinas, organonitrilas, benzonitrilas e acetonitrilas, são extensivamente estudados. Uma das características desses compostos é que eles podem mimetizar estruturas biológicas com propriedades específicas no metabolismo geral: ácidos nucleicos, entre outros. Eles também têm sido extensivamente estudados devido ao seu envolvimento em catálise redox e reações de transferência de elétrons. Neste trabalho foram analisados e compreendidos, cristalograficamente, o processo de formação de cristais organometálicos através da determinação estrutural por difração de raios X de dois cristais de Rutênio complexados com os ligantes 2,2-bipiridina e 1,3-bis(difenilfosfino)butano. Os compostos analisados foram o RUDPPBYPI e MB07, códigos adotados pelo grupo do Prof. Dr. Alzir Batista. Tais compostos foram fornecidos pelo grupo do Prof. Dr. Alzir Batista do Instituto de Química da Universidade Federal de São Carlos – UFSCar. Após a determinação estrutural dos compostos em estudo e do refinamento completo das estruturas – utilizando o software WinGX – conseguiu-se erros aproximados de 5% (RUDPPBYPI) e 3% (MB07), consideravelmente bastante baixos, satisfatórios e aceitáveis. A utilização do software ORTEP teve grande êxito, pois revelou as representações das imagens das moléculas devidamente resolvidas e refinadas. Confirmando que a metodologia empregada para a determinação da estrutura cristalina e molecular teve precisão e foi correta, pois o modelo obtido se aproxima, de fato, da estrutura real dos cristais.

Palavras-chave: complexos, estruturas, cristais.

ABSTRACT

Numerous ruthenium(II) crystals with π -unsaturated ligands, such as pyridines, organonitriles, benzonitriles and acetonitriles, are extensively studied. One of the characteristics of these compounds is that they can mimic biological structures with specific properties in general metabolism: nucleic acids, among others. They have also been extensively studied due to their involvement in redox catalysis and electron transfer reactions. In this work, the process of formation of organometallic crystals was analyzed and understood, crystallographically, through structural determination by X-ray diffraction of two ruthenium crystals complexed with the ligands 2,2-bipyridine and 1,3-bis(diphenylphosphino)butane. The compounds analyzed were RUDPPBYPI and MB07, codes adopted by Prof. Dr. Alzir Batista. Such compounds were provided by the group of Prof. Dr. Alzir Batista from the Chemistry Institute of the Federal University of São Carlos – UFSCar. After the structural determination of the compounds under study and the complete refinement of the structures – using the WinGX software – approximate errors of 5% (RUDPPBYPI) and 3% (MB07) were obtained, considerably quite low, satisfactory and acceptable. The use of the ORTEP software was very successful, as it revealed the representations of the images of the molecules duly resolved and refined. Confirming that the methodology used to determine the crystalline and molecular structure was accurate and correct, as the model obtained actually approximates the real structure of crystals.

Keywords: complex, structure, crystals.

LISTA DE FIGURAS

1	Faces de um sólido cristalino	11
2	Retículos de Bravais	12
3	Wilhelm Conrad Röntgen, primeiro físico a estudar os raios X	13
4	Radiografia da mão de Anna Bertha Ludwig	14
5	Difração de raios X em cristal	15
6	Experimento de Laue	15
7	Estruturas planares: (a) RUDPPBYPI. (b) MB07	16
8	Visão ORTEP do RUDPPBYPI, mostrando a marcação dos átomos e os elipsoides de 30% de probabilidade	22
9	Vista ORTEP do complexo MB07, mostrando a marcação dos átomos e os elipsóides de 30% de probabilidade	26

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Dados de cristal e refinamento de estrutura para RUDPPBYPI	17
Tabela 2	Coordenadas atômicas ($\times 10^4$) e parâmetros equivalentes de deslocamento isotrópico ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) para RUDPPBYPI. $U(\text{eq})$ é definido como um terço do traço do tensor U_{ij} ortogonalizado	18
Tabela 3	Comprimentos de ligação [\AA] e ângulos [$^\circ$] para RUDPPBYPI	20
Tabela 4	Dados do cristal MB07 e refinamento da estrutura	22
Tabela 5	Coordenadas atômicas ($\times 10^4$) e parâmetros equivalentes de deslocamento isotrópico ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) para MB07. $U(\text{eq})$ é definido como um terço do traço do tensor U_{ij} ortogonalizado	23
Tabela 6	Comprimentos de ligação [\AA] e ângulos [$^\circ$] para MB07	25

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	09
2	OBJETIVOS	10
2.1	Geral	10
2.2	Específicos	10
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	11
3.1	Cristais	11
3.2	Raios X	12
3.3	Difração de raios X	14
4	METODOLOGIA	16
4.1	Síntese dos complexos de rutênio	16
4.2	Obtenção de monocristais adequados à técnica utilizada	16
4.3	Coleta de dados por meio do difratômetro automático kappaccd da enraf nonius	16
4.4	Determinação da estrutura cristalina e molecular	17
5	RESULTADOS	17
6	CONCLUSÃO	28
	REFERÊNCIAS	29

1. INTRODUÇÃO

Originalmente o termo cristal vem do grego *krystallos* que significa gelo transparente. Mas ao longo dos anos esse termo foi associado àquilo que é limpo, puro e transparente, ou seja, cristal era aquilo que tinha forma externa definida (BLANCO, 2018). Já na atualidade, o conceito de cristal são arranjos atômicos ou moleculares organizados internamente (estrutura tridimensional repetida periodicamente) e, sendo assim, cada espécie possui uma célula unitária que se repete ordenadamente em todas as direções. A célula unitária é a unidade básica e descritora de cada cristal, com apenas um pequeno conjunto de células unitárias é possível descrever todas as estruturas cristalinas conhecidas (BLEICHER; SASAKI, 2000).

No ano de 1895, o Wilhelm Conrad Rontgen, físico alemão, estudava a detecção de radiação eletromagnética de alta frequência, incidindo eletricidade a raios catódicos em uma placa fluorescente de cianeto de platina e bário (BLEICHER; SASAKI, 2000). Ele observou que no fundo da sala de seu experimento, havia um brilho, praticamente imperceptível, logo, percebeu que não era a propagação dos raios catódicos (MARTINS, 1998). Portanto a esses raios, de natureza, até então, desconhecida, foi dado a denominação de “*X-strahlen*” – raios X (CARUSO, 2006; PEREIRA, 2012; ZANDONÁ, 2021).

Quando iluminados por um feixe de raios X colimado, cristais procedem como uma grade de difração tridimensional, produzindo efeitos de interferência destrutivos e construtivos. Eventos de interferência construtiva são evidenciados no detector igual a uma série de pontos discretos denominados de reflexões. Em um experimento típico, milhares de reflexões são medidas simultaneamente (AMBROSIO; FRANCHINI, 2017). Dessa forma, neste trabalho foram realizadas as coletas, processamento de dados e os refinamentos das estruturas dos cristais de rutênio RUDPPBYPI e MB07.

O rutênio (Ru) desperta a atenção de muitas pesquisas devido a sua multifuncionalidade e pelas várias atuações de seus complexos, tais como: energia solar para eletricidade, fotólise da água, catálise, entre outras. Também, forma complexo com diferentes ligantes e possui propriedades químicas que, em comparação com outros metais, podem ser facilmente controladas pela substituição dos ligantes (LIMA, 2015). No estudo das propriedades físico-químicas dessas substâncias, se tem um passo crucial para sua realização, que é a determinação da estrutura cristalina e molecular.

2. OBJETIVOS

2.1 Geral

Estudar cristalograficamente os compostos de rutênio, visando à compreensão e análise do processo de formação de complexos organometálicos.

2.2 Específicos

- Determinar, utilizando as técnicas de determinação de estruturas por difração de raios X em monocristais, as estruturas moleculares e estruturais dos complexos de rutênio;
- Analisar os parâmetros estruturais (distâncias, ângulos, ângulos de torção, interações intra e intermoleculares, empacotamento cristalino, etc.) dos compostos de rutênio obtidos por técnicas cristalográficas (difração de raios X);
- Comparar os parâmetros estruturais obtidos com estruturas semelhantes encontradas na literatura.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Cristais

Na antiguidade, os gregos utilizavam o termo *krystallos* que significa gelo, para descrever os cristais, em referência ao aspecto da água congelada e, com o passar do tempo, passou a ser relacionado àquilo que é puro, limpo e transparente (BLANCO, 2018). Nos dias atuais, notadamente a definição de Cristal são sólidos (podendo estar na fase atômica, molecular ou iônica) que possuem um arranjo ordenado, tendo faces bem definidas, conforme a Figura 1 (ATKINS, 2012).

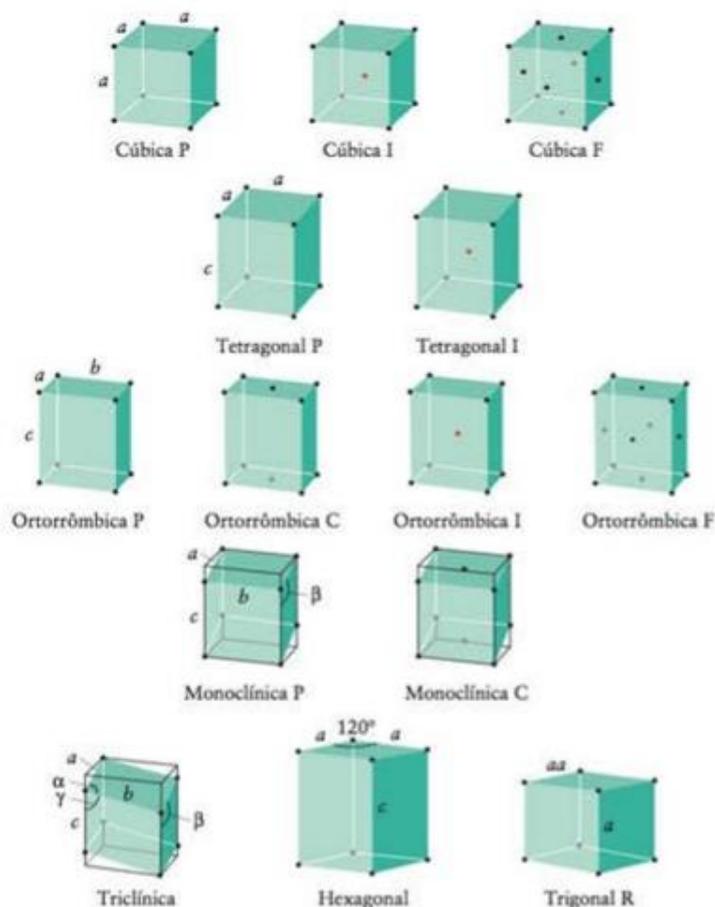
Figura 1 – Faces de um sólido cristalino



Fonte: ATKINS (2012)

Para estudos de estruturas cristalinas, não se faz necessário analisar por completo o cristal, apenas a célula unitária, a qual é a menor unidade do cristal que se repete por todo o sólido. Todas as estruturas cristalinas são descritas em 14 padrões básicos (conforme a Figura 2), também chamados de Retículos de Bravais, que são as combinações dos 7 sistemas cristalinos com os conteúdos das células unitárias (P, I, F, A, B, C, R) (CULLITY, 1956).

Figura 2 – Retículos de Bravais



Fonte: ATKINS (2012)

Conforme a figura, os 14 padrões são: as formas Cúbicas P, I e F; Tetragonal P e I; Ortorrômbica P, C, I e F; Monoclínica P e C; Triclínica; Hexagonal; Trigonal; sendo as siglas P, I, F, C e R, respectivamente: primitiva, corpo centrado, faces centradas, um ponto reticular em duas faces opostas, e romboédrico (ATKINS, 2012).

3.2 Raios X

O descobrimento dos raios X foi possível por meio de experimentos utilizando “tubos catódicos”, os quais são formados de um tundo de vidro, ligado a bomba de vácuo, tendo uma corrente elétrica produzida dentro do tubo através de alta tensão gerada entre dois terminais opostos da bomba de vácuo (BLEICHER; SASAKI, 2000).

No ano de 1895, Wilhelm Conrad Röntgen (conforme a Figura 3), físico alemão, investigava a captação de radiação eletromagnética de alta frequência a partir de um tubo de raios catódicos. Ele visualizou que um papel de platino-cianeto de bário estava fluorescendo ainda que o tubo estivesse encoberto por uma caixa de papelão preto. Röntgen, então, pode enxergar que se tratava de algo desconhecido até aquele momento e, assim, estudou de forma exaustiva aquela radiação, destrinchando suas propriedades: propagação em linha, alta capacidade de penetração, indiferença à campos magnéticos e capacidade de impressionar chapas fotográficas (BLEICHER; SASAKI, 2000). Um de seus experimentos foi com sua esposa, Anna Bertha Ludwig, a qual colocou a mão frente ao filme e, assim, foi obtida a primeira radiografia de humanos em toda a história, visualizando os ossos e o anel em sua mão, conforme a Figura 4. (MARTINS, 2005).

Figura 3 – Wilhelm Conrad Röntgen, primeiro físico a estudar os raios X



Fonte: BLEICHER (2000)

Figura 4 – Radiografia da mão de Anna Bertha Ludwig



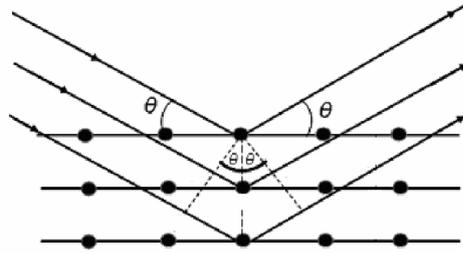
Fonte: MARTINS (2005)

Rontgen também fez experimentos buscando visualizar reflexão, refração ou difração, porém sem sucesso. Sua descoberta foi impactante à mídia na época, antes mesmo de ser publicada no meio científico. Então se iniciaram os estudos na área médica, vislumbrando o potencial dos raios X para diagnósticos e terapias. Ele conseguiu o Prêmio Nobel de Física em 1901, com 56 anos de idade (BLEICHER; SASAKI, 2000).

3.3 Difração de raios X

A técnica da Difração de raios X é proveniente das interações dos raios X com as estruturas sólidas, no qual, partes do feixe incidente saem de diferentes direções com o mesmo comprimento de onda, uma propriedade associada às ondas, as quais conseguem contornar obstáculos e passar por todos os canais. Esta técnica é utilizada para se conseguir características e informações da matéria em estudo (Figura 5) (CULLITY, 1956).

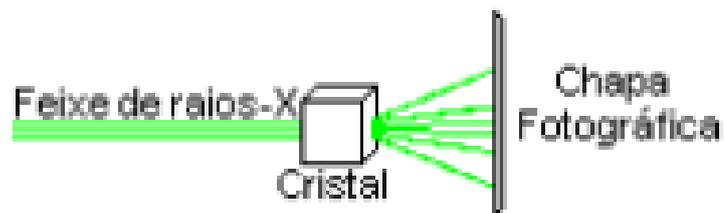
Figura 5 – Difração de raios X em cristal



Fonte: Autor (2023)

Em 1914, o físico alemão, Max von Laue, fez um teste para evidenciar a reflexão de um feixe de raios X em um cristal, conforme a Figura 6.

Figura 6 – Experimento de Laue



Fonte: BLEICHER (2000)

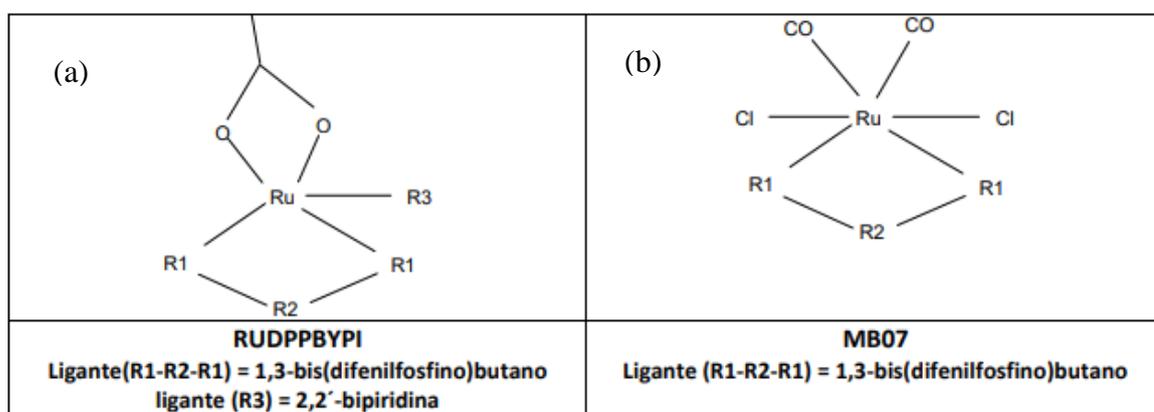
Portanto, com a difração de raios X, sua natureza ondulatória foi demonstrada e a técnica tornou-se muito útil na determinação de estruturas cristalinas, sendo esta uma das práticas mais importantes na caracterização microestrutural de materiais cristalinos, sendo utilizada em diversas áreas.

4. METODOLOGIA

4.1 Síntese dos complexos de rutênio

Os complexos foram sintetizados pelo grupo de pesquisa do Professor Dr. Alzir Batista do Instituto de Química da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar) e destinado à realização deste trabalho para resolução estrutural (Figura 7).

Figura 7 – Estruturas planares: (a) RUDPPBYPI. (b) MB07



Fonte: Autor (2023)

4.2 Obtenção de monocristais adequados à técnica utilizada

Os cristais recebidos já vieram adequados à técnica de difração de raios X, portanto não sendo necessária a busca por solventes e condições físicas ideais para processo de cristalização.

4.3 Coleta de dados por meio do Difratorômetro Automático KappaCCD da Enraf Nonius

A partir das amostras dos compostos em estudo, foram colhidos dados das intensidades difratadas. Foi colado em uma fibra de vidro, auxiliado de microscópio, um cristal da ordem de décimo de milímetros e, em seguida, montado no difratômetro do laboratório de Cristalografia (Difratorômetro Automático KappaCCD). As etapas realizadas no equipamento foram: averiguação de reflexões iniciais, seleção de célula unitária e grupo espacial até obter a estrutura ideal para a coleta das intensidades.

4.4 Determinação da estrutura cristalina e molecular

Com a obtenção dos monocristais, foi realizada a difração dos raios X por meio do difratômetro. Com isso, tornou-se possível proceder com a determinação estrutural através do software WinGX (ENRAF-NONIUS (1997-2000); SHELDRIK (1997); FARRUGIA, 1997). Posteriormente, os dados adquiridos (distâncias, ângulos, ângulos de torção, interações intra e intermoleculares, empacotamento cristalino) foram analisados e equiparados a grupos de estrutura semelhantes na literatura.

5. RESULTADOS

A partir da coleta de dados das amostras no difratômetro de raios X, obteve-se resultados cristalográficos por meio de conjuntos de parâmetros eletrônicos, os quais passaram por processos de refinamento de estrutura, modelagem molecular e, posteriormente, foi gerada suas representações gráficas através dos softwares WinGX e ORTEP, respectivamente. Os resultados estruturais obtidos para os compostos RUDPPBYPI e MB07 encontram-se nas Tabelas de 1 a 6 e, a representação ORTEP, nas figuras 8 e 9.

Tabela 1 – Dados de cristal e refinamento de estrutura para RUDPPBYPI

Fórmula empírica	Ru S P ₂ O ₆ N ₂ C ₄₀ H ₃₉
Peso da Fórmula	838.80
Temperatura	293(2) K
Comprimento de onda	0.71073 Å
Sistema cristalino	Monoclínico
Grupo Espacial	P2 ₁ /n
Dimensões da célula unitária	a = 17.5841(4) Å b = 9.5434(2) Å β = 103.1600(10)°. c = 22.7953(6) Å
Volume	3724.87(15) Å ³
Z	4
Densidade (calculada)	1.496 Mg/m ³
Coefficiente de absorção	0.613 mm ⁻¹
F(000)	1724
Tamanho do cristal	0.08 x 0.02 x 0.01 mm ³

Faixa Theta para coleta de dados	3.17 to 25.80°.
Intervalos de índice	-21 ≤ h ≤ 21, -9 ≤ k ≤ 11, -27 ≤ l ≤ 26
Reflexões coletadas	34798
Reflexões independentes	7023 [R(int) = 0.0835]
Completude para theta = 25.80°	97.9 %
Correção de absorção	Gaussian
Transmissão máx. e min.	0.975 e 0.948
Método de refinamento	Full-matrix least-squares on F ²
Computando ^a	COLLECT, HKL Denzo and Scalepack SHELXS-97, SHELXL-97
Dados / restrições / parâmetros	7023 / 0 / 469
Qualidade de ajuste em F ²	1.027
Índices R finais [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0561, wR2 = 0.1333
Índices R (todos os dados)	R1 = 0.0834, wR2 = 0.1477

Fonte: Autor (2023)

Tabela 2 – Coordenadas atômicas (x10⁴) e parâmetros equivalentes de deslocamento isotrópico (Å²x 10³) para RUDPPBYPI. U(eq) é definido como um terço do traço do tensor U_{ij} ortogonalizado

	x	y	z	U(eq)
Ru(1)	3414(1)	7003(1)	371(1)	41(1)
S	5102(1)	2474(2)	3213(1)	66(1)
P(1)	2578(1)	6268(1)	-518(1)	44(1)
P(2)	2447(1)	7487(1)	856(1)	43(1)
N(1)	3602(2)	5144(4)	850(2)	48(1)
N(2)	4301(2)	7572(4)	1118(2)	45(1)
O(1)	4359(2)	7090(4)	-123(2)	54(1)
O(2)	3625(2)	8872(4)	-81(2)	54(1)
O(3)	4279(2)	2593(6)	2984(2)	87(1)
O(4)	5469(4)	3759(8)	3135(3)	157(3)
O(5)	5270(3)	2161(7)	3821(2)	108(2)
O(6)	5419(3)	1551(9)	2863(3)	146(3)
C(1)	1518(3)	6253(6)	-597(2)	56(1)
C(2)	1189(3)	5249(6)	-194(2)	59(1)

C(3)	1020(3)	5909(7)	371(3)	65(2)
C(4)	1712(3)	6141(6)	900(2)	55(1)
C(5)	2643(3)	7293(5)	-1192(2)	52(1)
C(6)	2116(3)	8331(6)	-1417(2)	62(1)
C(7)	2159(4)	9037(7)	-1947(3)	77(2)
C(8)	2737(5)	8707(8)	-2236(3)	88(2)
C(9)	3275(5)	7686(8)	-2010(3)	81(2)
C(10)	3229(4)	6979(7)	-1497(3)	68(2)
C(11)	2806(3)	4513(5)	-743(2)	46(1)
C(12)	3559(3)	3985(6)	-555(3)	61(1)
C(13)	3732(3)	2632(6)	-707(3)	68(2)
C(14)	3165(3)	1803(6)	-1052(3)	66(2)
C(15)	2426(3)	2322(6)	-1247(3)	62(1)
C(16)	2240(3)	3666(6)	-1101(2)	55(1)
C(17)	4209(2)	8360(5)	-269(2)	39(1)
C(18)	4567(3)	9028(5)	-556(2)	43(1)
C(19)	4608(3)	8868(5)	1234(2)	51(1)
C(20)	5200(3)	9137(7)	1727(3)	68(2)
C(21)	5486(4)	8066(7)	2116(3)	78(2)
C(22)	5183(4)	6744(7)	2003(3)	74(2)
C(23)	4591(3)	6518(6)	1495(2)	54(1)
C(24)	4209(3)	5153(6)	1343(2)	58(1)
C(25)	4424(4)	3978(6)	1680(3)	79(2)
C(26)	4025(5)	2736(7)	1532(3)	91(2)
C(27)	3403(4)	2721(6)	1040(3)	79(2)
C(28)	3208(3)	3921(5)	716(2)	57(1)
C(29)	2848(3)	7775(5)	1658(2)	49(1)
C(30)	3082(3)	9103(6)	1879(2)	62(1)
C(31)	3439(4)	9294(8)	2479(3)	78(2)
C(32)	3562(5)	8182(10)	2865(3)	96(2)
C(33)	3333(5)	6867(9)	2668(3)	95(2)
C(34)	2984(4)	6664(7)	2061(3)	72(2)
C(35)	1864(3)	9049(5)	621(2)	47(1)
C(36)	1284(3)	9434(6)	916(3)	60(1)
C(37)	810(3)	10562(6)	727(3)	70(2)
C(38)	910(4)	11346(7)	239(3)	78(2)

C(39)	1481(4)	10994(7)	-61(3)	70(2)
C(40)	1962(3)	9859(5)	136(2)	57(1)

Fonte: Autor (2023)

Tabela 3 – Comprimentos de ligação [Å] e ângulos [°] para RUDPPBYPI

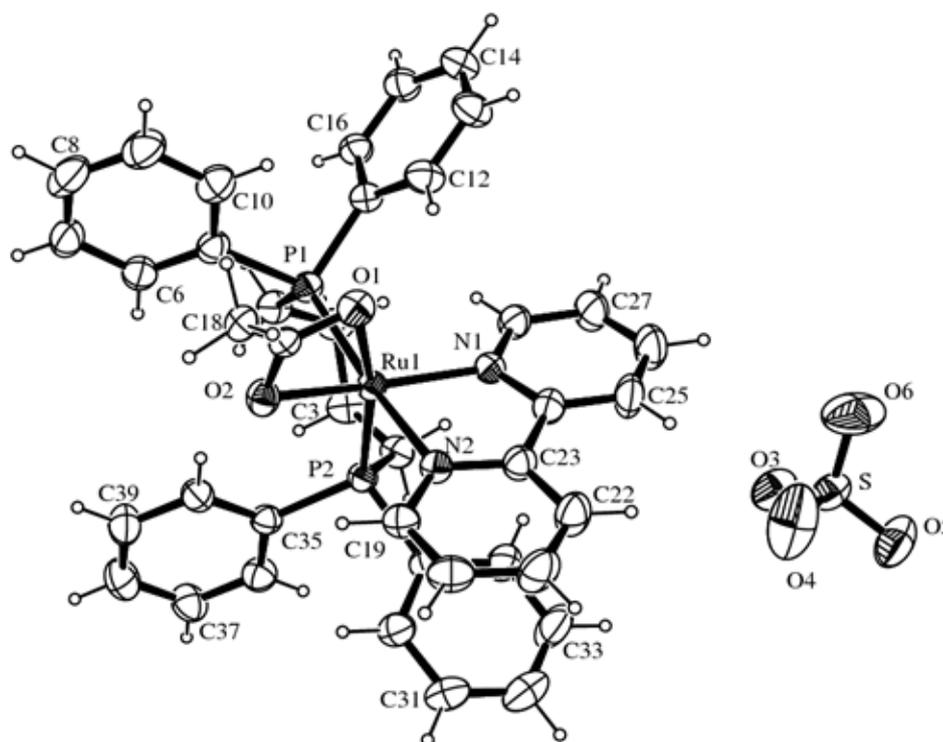
Ru(1)-N(1)	2.070(4)	S-O(3)	1.426(4)
Ru(1)-N(2)	2.103(4)	P(1)-C(11)	1.824(5)
Ru(1)-O(2)	2.133(3)	P(1)-C(1)	1.831(5)
Ru(1)-O(1)	2.210(3)	P(1)-C(5)	1.846(5)
Ru(1)-P(2)	2.2763(12)	P(2)-C(35)	1.820(5)
Ru(1)-P(1)	2.3229(12)	P(2)-C(29)	1.825(5)
Ru(1)-C(17)	2.586(4)	P(2)-C(4)	1.842(5)
S-O(5)	1.382(5)	N(1)-C(28)	1.356(6)
S-O(6)	1.387(6)	N(1)-C(24)	1.362(6)
S-O(4)	1.415(7)	N(2)-C(23)	1.345(6)
N(2)-C(19)	1.352(6)	C(20)-C(21)	1.372(9)
O(1)-C(17)	1.269(6)	C(21)-C(22)	1.371(8)
O(2)-C(17)	1.295(5)	C(22)-C(23)	1.387(7)
C(1)-C(2)	1.529(7)	C(23)-C(24)	1.471(7)
C(2)-C(3)	1.523(7)	C(24)-C(25)	1.363(8)
C(3)-C(4)	1.521(7)	C(25)-C(26)	1.379(9)
C(5)-C(6)	1.373(8)	C(26)-C(27)	1.377(9)
C(5)-C(10)	1.402(8)	C(27)-C(28)	1.365(8)
C(6)-C(7)	1.401(8)	C(29)-C(34)	1.387(8)
C(7)-C(8)	1.367(10)	C(29)-C(30)	1.391(7)
C(8)-C(9)	1.374(10)	C(30)-C(31)	1.381(8)
C(9)-C(10)	1.368(8)	C(31)-C(32)	1.365(10)
C(11)-C(12)	1.390(7)	C(32)-C(33)	1.363(11)
C(11)-C(16)	1.393(7)	C(33)-C(34)	1.394(9)
C(12)-C(13)	1.388(8)	C(35)-C(40)	1.392(7)
C(13)-C(14)	1.372(8)	C(35)-C(36)	1.392(7)
C(14)-C(15)	1.367(8)	C(36)-C(37)	1.369(8)
C(15)-C(16)	1.383(8)	C(37)-C(38)	1.383(9)
C(17)-C(18)	1.191(6)	C(38)-C(39)	1.379(8)
C(19)-C(20)	1.370(7)	C(39)-C(40)	1.385(8)
N(1)-Ru(1)-N(2)	78.09(15)	O(1)-Ru(1)-P(1)	88.13(10)
N(1)-Ru(1)-O(2)	161.16(15)	P(2)-Ru(1)-P(1)	95.20(4)
N(2)-Ru(1)-O(2)	89.82(14)	N(1)-Ru(1)-C(17)	133.23(15)

N(1)-Ru(1)-O(1)	104.61(14)	N(2)-Ru(1)-C(17)	86.09(14)
N(2)-Ru(1)-O(1)	84.17(14)	O(2)-Ru(1)-C(17)	29.93(13)
O(2)-Ru(1)-O(1)	59.31(13)	O(1)-Ru(1)-C(17)	29.38(13)
N(1)-Ru(1)-P(2)	87.97(11)	P(2)-Ru(1)-C(17)	137.05(11)
N(2)-Ru(1)-P(2)	92.96(11)	P(1)-Ru(1)-C(17)	88.60(10)
O(2)-Ru(1)-P(2)	107.24(10)	O(5)-S-O(6)	114.6(4)
O(1)-Ru(1)-P(2)	166.14(10)	O(5)-S-O(4)	108.3(4)
N(1)-Ru(1)-P(1)	101.19(11)	O(6)-S-O(4)	102.9(5)
N(2)-Ru(1)-P(1)	171.78(11)	O(5)-S-O(3)	110.6(3)
O(2)-Ru(1)-P(1)	88.70(10)	O(6)-S-O(3)	110.4(3)
O(4)-S-O(3)	109.8(4)	C(13)-C(12)-C(11)	120.5(5)
C(11)-P(1)-C(1)	104.4(2)	C(14)-C(13)-C(12)	120.6(5)
C(11)-P(1)-C(5)	101.1(2)	C(15)-C(14)-C(13)	119.3(5)
C(1)-P(1)-C(5)	100.1(2)	C(14)-C(15)-C(16)	121.2(5)
C(11)-P(1)-Ru(1)	112.79(16)	C(15)-C(16)-C(11)	120.1(5)
C(1)-P(1)-Ru(1)	121.07(18)	C(18)-C(17)-O(1)	123.4(5)
C(5)-P(1)-Ru(1)	114.75(16)	C(18)-C(17)-O(2)	122.6(5)
C(35)-P(2)-C(29)	103.5(2)	O(1)-C(17)-O(2)	114.0(4)
C(35)-P(2)-C(4)	103.4(2)	C(18)-C(17)-Ru(1)	177.7(4)
C(29)-P(2)-C(4)	99.5(2)	O(1)-C(17)-Ru(1)	58.7(2)
C(35)-P(2)-Ru(1)	117.17(16)	O(2)-C(17)-Ru(1)	55.3(2)
C(29)-P(2)-Ru(1)	110.95(16)	N(2)-C(19)-C(20)	121.7(5)
C(4)-P(2)-Ru(1)	119.76(18)	C(19)-C(20)-C(21)	119.3(5)
C(28)-N(1)-C(24)	117.0(4)	C(22)-C(21)-C(20)	119.6(5)
C(28)-N(1)-Ru(1)	127.4(3)	C(21)-C(22)-C(23)	119.1(6)
C(24)-N(1)-Ru(1)	115.5(3)	N(2)-C(23)-C(22)	121.3(5)
C(23)-N(2)-C(19)	118.9(4)	N(2)-C(23)-C(24)	115.2(4)
C(23)-N(2)-Ru(1)	115.3(3)	C(22)-C(23)-C(24)	123.4(5)
C(19)-N(2)-Ru(1)	125.7(3)	N(1)-C(24)-C(25)	121.7(5)
C(17)-O(1)-Ru(1)	91.9(3)	N(1)-C(24)-C(23)	115.4(4)
C(17)-O(2)-Ru(1)	94.8(3)	C(25)-C(24)-C(23)	122.9(5)
C(2)-C(1)-P(1)	117.5(4)	C(24)-C(25)-C(26)	120.6(6)
C(3)-C(2)-C(1)	115.0(5)	C(27)-C(26)-C(25)	118.2(6)
C(4)-C(3)-C(2)	117.0(4)	C(28)-C(27)-C(26)	119.2(6)
C(3)-C(4)-P(2)	120.2(4)	N(1)-C(28)-C(27)	123.2(5)
C(6)-C(5)-C(10)	118.5(5)	C(34)-C(29)-C(30)	117.7(5)
C(6)-C(5)-P(1)	122.0(4)	C(34)-C(29)-P(2)	121.1(4)
C(10)-C(5)-P(1)	119.5(4)	C(30)-C(29)-P(2)	121.0(4)
C(5)-C(6)-C(7)	120.4(6)	C(31)-C(30)-C(29)	120.6(6)
C(8)-C(7)-C(6)	119.7(6)	C(32)-C(31)-C(30)	120.3(6)
C(7)-C(8)-C(9)	120.5(6)	C(33)-C(32)-C(31)	120.8(6)
C(10)-C(9)-C(8)	120.0(7)	C(32)-C(33)-C(34)	119.1(7)

C(9)-C(10)-C(5)	120.8(6)	C(29)-C(34)-C(33)	121.4(6)
C(12)-C(11)-C(16)	118.3(5)	C(40)-C(35)-C(36)	118.3(5)
C(12)-C(11)-P(1)	120.1(4)	C(40)-C(35)-P(2)	121.6(4)
C(16)-C(11)-P(1)	121.6(4)	C(36)-C(35)-P(2)	120.0(4)
C(37)-C(36)-C(35)	121.0(5)	C(38)-C(39)-C(40)	119.4(6)
C(36)-C(37)-C(38)	119.9(6)	C(39)-C(40)-C(35)	120.9(5)
C(39)-C(38)-C(37)	120.4(6)		

Fonte: Autor (2023)

Figura 8 – Visão ORTEP do RUDPPBYPI, mostrando a marcação dos átomos e os elipsoides de 30% de probabilidade



Fonte: Autor (2023)

Tabela 4 – Dados do cristal MB07 e refinamento da estrutura

Fórmula empírica	Ru Cl ₂ P ₂ O ₂ C ₃₀ H ₂₈
Peso da Fórmula	654.43
Temperatura	293(2) K

Comprimento de onda	0.71073 Å
Sistema cristalino	Monoclínico
Grupo Espacial	P2 ₁ /c
Dimensões da célula unitária	a = 15.2296(3) Å b = 9.8707(2) Å β = 94.8560(10)°. c = 19.5489(4) Å
Volume	2928.18(10) Å ³
Z	4
Densidade (calculada)	1.484 Mg/m ³
Coefficiente de absorção	0.853 mm ⁻¹
F(000)	1328
Tamanho do cristal	0.044 x 0.172 x 0.258 mm ³
Faixa Theta para coleta de dados	3.16 to 26.59°.
Intervalos de índice	-19 ≤ h ≤ 19, -12 ≤ k ≤ 12, -22 ≤ l ≤ 24
Reflexões coletadas	19409
Reflexões independentes	6124 [R(int) = 0.0550]
Completude para theta = 26.59°	99.7 %
Correção de absorção	Gaussian
Transmissão máx. e min.	0.963 e 0.839
Método de refinamento	Full-matrix least-squares on F ²
Computando ^a	COLLECT, HKL Denzo and Scalepack SHELXS-97, SHELXL-97
Dados / restrições / parâmetros	6124 / 0 / 334
Qualidade de ajuste em F ²	1.017
Índices R finais [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0360, wR2 = 0.0737
Índices R (todos os dados)	R1 = 0.0653, wR2 = 0.0817

Fonte: Autor (2023)

Tabela 5 – Coordenadas atômicas (x10⁴) e parâmetros equivalentes de deslocamento isotrópico (Å²x10³) para MB07. U(eq) é definido como um terço do traço do tensor U_{ij} ortogonalizado.

	x	y	z	U(eq)
C(1')	3790(2)	5967(3)	3166(2)	49(1)

C(2')	3968(2)	4439(3)	3193(2)	56(1)
C(3')	3981(2)	3701(3)	2508(2)	55(1)
C(4')	3068(2)	3283(3)	2179(1)	43(1)
C(5')	2599(3)	8583(4)	1542(2)	67(1)
C(6')	2703(2)	6748(3)	515(2)	53(1)
C(111)	3465(2)	3411(3)	802(1)	37(1)
C(112)	4259(2)	3963(4)	674(2)	62(1)
C(113)	4838(2)	3273(4)	287(2)	73(1)
C(114)	4614(2)	2045(4)	15(2)	68(1)
C(115)	3835(3)	1492(4)	127(2)	79(1)
C(116)	3256(2)	2161(4)	514(2)	64(1)
C(121)	1668(2)	3504(3)	1083(1)	38(1)
C(122)	1299(2)	3912(3)	442(2)	52(1)
C(123)	485(2)	3461(4)	186(2)	69(1)
C(124)	25(3)	2627(5)	556(3)	83(1)
C(125)	357(3)	2198(4)	1186(2)	81(1)
C(126)	1195(2)	2628(3)	1459(2)	59(1)
C(211)	1926(2)	5578(3)	3182(1)	38(1)
C(212)	1253(2)	4858(3)	2830(2)	48(1)
C(213)	682(2)	4072(4)	3176(2)	64(1)
C(214)	784(2)	3998(4)	3873(2)	71(1)
C(215)	1438(2)	4696(4)	4237(2)	68(1)
C(216)	2018(2)	5501(3)	3896(2)	52(1)
C(221)	2619(2)	8248(3)	3094(1)	41(1)
C(222)	1793(2)	8761(3)	3164(2)	59(1)
C(223)	1686(3)	10071(4)	3403(2)	78(1)
C(224)	2408(3)	10862(4)	3580(2)	82(1)
C(225)	3228(3)	10364(4)	3506(2)	78(1)
C(226)	3341(2)	9070(3)	3265(2)	60(1)
Cl(1)	4262(1)	6933(1)	1589(1)	62(1)
Cl(2)	1096(1)	6711(1)	1386(1)	57(1)
O(1)	2742(2)	6846(3)	-51(1)	88(1)
O(2)	2541(3)	9723(3)	1546(2)	115(1)
P(1)	2735(1)	4197(1)	1390(1)	31(1)
P(2)	2736(1)	6550(1)	2743(1)	34(1)
Ru(1)	2685(1)	6644(1)	1488(1)	34(1)

Fonte: Autor, 2023.

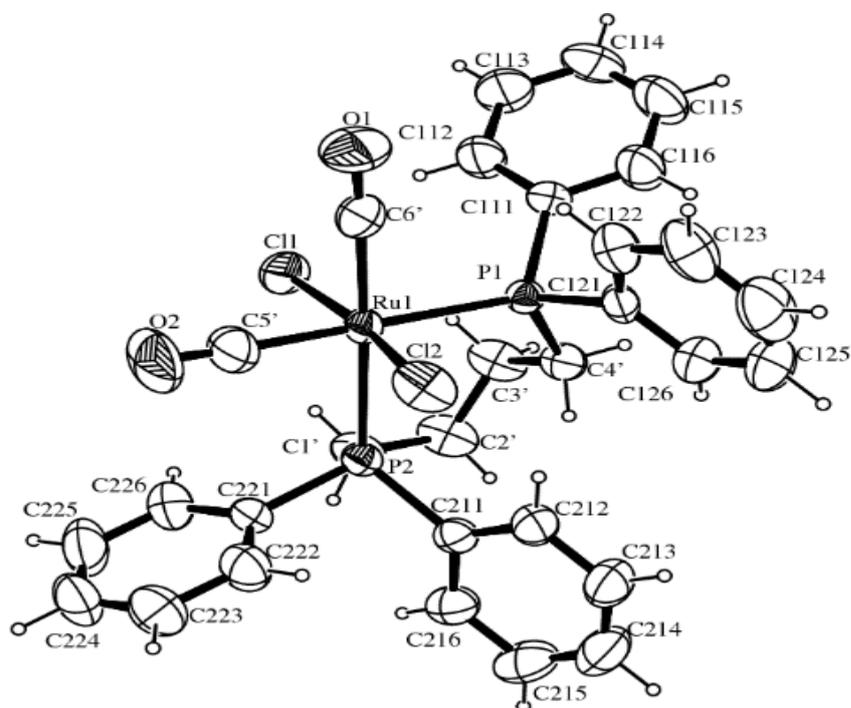
Tabela 6 – Comprimentos de ligação [Å] e ângulos [°] para MB07

C(1')-C(2')	1.533(4)	C(124)-C(125)	1.358(6)
C(1')-P(2)	1.835(3)	C(125)-C(126)	1.406(5)
C(2')-C(3')	1.526(4)	C(211)-C(212)	1.382(4)
C(3')-C(4')	1.538(4)	C(211)-C(216)	1.392(4)
C(4')-P(1)	1.821(3)	C(211)-P(2)	1.832(3)
C(5')-O(2)	1.128(4)	C(212)-C(213)	1.384(4)
C(5')-Ru(1)	1.922(4)	C(213)-C(214)	1.359(5)
C(6')-O(1)	1.118(4)	C(214)-C(215)	1.362(5)
C(6')-Ru(1)	1.908(3)	C(215)-C(216)	1.399(5)
C(111)-C(112)	1.369(4)	C(221)-C(222)	1.373(4)
C(111)-C(116)	1.382(4)	C(221)-C(226)	1.385(4)
C(111)-P(1)	1.837(3)	C(221)-P(2)	1.826(3)
C(112)-C(113)	1.389(4)	C(222)-C(223)	1.390(5)
C(113)-C(114)	1.355(5)	C(223)-C(224)	1.369(5)
C(114)-C(115)	1.342(5)	C(224)-C(225)	1.361(6)
C(115)-C(116)	1.377(4)	C(225)-C(226)	1.378(5)
C(121)-C(126)	1.378(4)	Cl(1)-Ru(1)	2.4110(8)
C(121)-C(122)	1.388(4)	Cl(2)-Ru(1)	2.4121(8)
C(121)-P(1)	1.818(3)	P(1)-Ru(1)	2.4247(7)
C(122)-C(123)	1.372(4)	P(2)-Ru(1)	2.4496(7)
C(123)-C(124)	1.333(6)	C(114)-C(115)-C(116)	120.7(3)
C(2')-C(1')-P(2)	118.0(2)	C(115)-C(116)-C(111)	121.1(3)
C(3')-C(2')-C(1')	117.1(3)	C(126)-C(121)-C(122)	118.3(3)
C(2')-C(3')-C(4')	114.6(3)	C(126)-C(121)-P(1)	123.6(2)
C(3')-C(4')-P(1)	113.5(2)	C(122)-C(121)-P(1)	118.1(2)
O(2)-C(5')-Ru(1)	177.2(3)	C(123)-C(122)-C(121)	121.3(3)
O(1)-C(6')-Ru(1)	177.1(3)	C(124)-C(123)-C(122)	120.2(4)
C(112)-C(111)-C(116)	117.2(3)	C(123)-C(124)-C(125)	120.8(4)
C(112)-C(111)-P(1)	122.5(2)	C(124)-C(125)-C(126)	120.4(4)
C(116)-C(111)-P(1)	120.1(2)	C(121)-C(126)-C(125)	119.0(3)
C(111)-C(112)-C(113)	121.1(3)	C(212)-C(211)-C(216)	118.5(3)
C(114)-C(113)-C(112)	120.2(3)	C(212)-C(211)-P(2)	122.4(2)
C(115)-C(114)-C(113)	119.8(3)	C(221)-P(2)-C(1')	103.17(14)
C(216)-C(211)-P(2)	119.0(2)	C(211)-P(2)-C(1')	102.85(14)
C(211)-C(212)-C(213)	121.0(3)	C(221)-P(2)-Ru(1)	110.22(9)
C(214)-C(213)-C(212)	119.8(3)	C(211)-P(2)-Ru(1)	121.58(9)
C(213)-C(214)-C(215)	120.9(3)	C(1')-P(2)-Ru(1)	114.59(10)
C(214)-C(215)-C(216)	120.1(3)	C(6')-Ru(1)-C(5')	90.46(13)

C(211)-C(216)-C(215)	119.7(3)	C(6')-Ru(1)-Cl(1)	88.68(10)
C(222)-C(221)-C(226)	118.4(3)	C(5')-Ru(1)-Cl(1)	87.11(12)
C(222)-C(221)-P(2)	119.7(2)	C(6')-Ru(1)-Cl(2)	90.88(10)
C(226)-C(221)-P(2)	121.8(2)	C(5')-Ru(1)-Cl(2)	84.55(12)
C(221)-C(222)-C(223)	120.8(3)	Cl(1)-Ru(1)-Cl(2)	171.64(3)
C(224)-C(223)-C(222)	120.0(4)	C(6')-Ru(1)-P(1)	88.37(9)
C(225)-C(224)-C(223)	119.5(4)	C(5')-Ru(1)-P(1)	177.61(12)
C(224)-C(225)-C(226)	120.9(4)	Cl(1)-Ru(1)-P(1)	94.95(3)
C(225)-C(226)-C(221)	120.4(3)	Cl(2)-Ru(1)-P(1)	93.38(3)
C(121)-P(1)-C(4')	105.69(14)	C(6')-Ru(1)-P(2)	177.21(10)
C(121)-P(1)-C(111)	101.88(12)	C(5')-Ru(1)-P(2)	88.81(10)
C(4')-P(1)-C(111)	100.39(13)	Cl(1)-Ru(1)-P(2)	88.60(3)
C(121)-P(1)-Ru(1)	111.56(9)	Cl(2)-Ru(1)-P(2)	91.73(3)
C(4')-P(1)-Ru(1)	115.79(10)	P(1)-Ru(1)-P(2)	92.46(2)
C(111)-P(1)-Ru(1)	119.68(9)		
C(221)-P(2)-C(211)	102.31(12)		

Fonte: Autor (2023)

Figura 9 – Vista ORTEP do complexo MB07, mostrando a marcação dos átomos e os elipsóides de 30% de probabilidade



Fonte: Autor (2023)

Diante dos resultados apresentados acima, para o **RUDPPBYPI**, é possível inferir que a estrutura refinada apresentou um sistema cristalino monoclinico, grupo espacial $P2_1/n$, com quatro moléculas por célula unitária e índice final $R_1 = 0.0561$, o qual mostra a porcentagem de erro da mesma, onde esta tem, aproximadamente, 5,6% de erro que é bastante baixo, satisfatório e considerável aceitável. Também foram um total de 34798 reflexões, sendo destas 7023 independentes, com $R(\text{int}) = 0.0835$. Vista na Figura 7, a molécula SO_4 é um contra-íon, uma espécie iônica que mantém a neutralidade elétrica. Os comprimentos de ligações e ângulos são de grande importância para a visualização da estrutura molecular do cristal e permitem visualizar suas distorções nas ligações. Os ângulos e comprimentos de ligação (distâncias interatômicas) entre o rutênio e os doadores dos ligantes encontram-se na faixa constituída encontrada na literatura ($\text{Ru-N} = 2,105 \text{ \AA}$; $\text{Ru-P} = 2,319 \text{ \AA}$ e $\text{Ru-Cl} = 2,430 \text{ \AA}$) para os cristais de rutênio(II) (SANTOS, 2011). Dessa forma, confirma-se que a determinação da estrutura cristalina e molecular foi realizada corretamente, coerente e o modelo obtido se aproxima, de fato, da estrutura real do composto.

De forma semelhante, para o **MB07** nota-se que a estrutura refinada apresentou um sistema cristalino monoclinico, grupo espacial $P2_1/c$, com quatro moléculas por célula unitária e índice final $R_1 = 0.0360$, o qual revela a porcentagem de erro da mesma, onde esta mostrou, aproximadamente, 3,6% de erro que é bastante baixo, satisfatório e considerável aceitável; também foram um total de 19409 reflexões. Os comprimentos de ligações e ângulos são de grande importância para a visualização da estrutura molecular do cristal e permitem visualizar suas distorções nas ligações. Os ângulos e comprimentos de ligação (distâncias interatômicas) entre o rutênio e os doadores dos ligantes encontram-se na faixa constituída encontrada na literatura ($\text{Ru-N} = 2,105 \text{ \AA}$; $\text{Ru-P} = 2,319 \text{ \AA}$ e $\text{Ru-Cl} = 2,430 \text{ \AA}$) para os cristais de rutênio(II) (SANTOS, 2011). Dessa forma, ratifica-se que a determinação da estrutura cristalina e molecular foi executada de maneira correta, coerente e o modelo alcançado se aproxima, de fato, da estrutura real do composto.

6. CONCLUSÃO

Os resultados obtidos para as estruturas cristalinas dos complexos de rutênio mostraram ser concordantes com dados estruturais de compostos com estruturas semelhantes encontrados na literatura. As propostas estruturais fornecidas pelo grupo do Prof. Alzir Batista foram confirmadas através da determinação por difração de raios X.

As estruturas ficaram bem caracterizadas tridimensionalmente, com todos os comprimentos de ligação, ângulos interatômicos e ângulos de torção determinados e confirmados com os da literatura.

Vale ressaltar que os dados estruturais obtidos serão de fundamental importância para o desenho racional de fármacos, visto que a interação fármaco-receptor ocorre através de mecanismos complementares estéricos, químicos e geométricos, entre ligantes e alvos moleculares específicos.

REFERÊNCIAS

AMBROSIO, André L. B.; FRANCHINI, Kleber Gomes. Cristalografia macromolecular: a biologia sob a ótica dos raios X. **Cienc. Cult.**, São Paulo, v. 69, n. 3, p. 29-36. 2017.

ATKINS, Peter; JONES, Loretta. **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente.** Tradução da 5ª edição norte-americana. 5ª edição. Porto Alegre: Bookman, 2012. p.930. ISBN 978-85-407-0054-3.

BLANCO, Patrícia. O reino dos cristais. **MKorn**, 2018. Disponível em: <<https://mkorn.com.br/o-reino-dos-cristais/>>. Acesso em: 30 jul. 2023.

BLEICHER, Lucas; SASAKI, José M. **Introdução à difração de raios X em cristais.** Universidade Federal do Ceará, 2000.

CARUSO, Francisco O. V. **Física Moderna - Caruso e Oguri.pdf.** 2ª ed. Elsevier, 2006.

CULLITY, B. D. **Elements of X-ray diffraction.** Addison-Wesley Publishing Company Inc., 1956. Acesso em 03/07/2023.

ENRAF-NONIUS. **Collect.** Nonius BV, Delft, The Netherlands (1997-2000).

FARRUGIA, L. J. **ORTEP3 for Windows**, J. Appl. Cryst., 30, 565 (1997).

GERASIMCHUK, N. N.; BOWMAN-JAMES, K. **Encyclopedia of Inorganic Chemistry.** King, R.B. (Ed), New York, Wiley Interscience, 1994.

LIMA, B. A. V. **Estudo teórico das propriedades de complexos de rutênio contendo ligantes bifosfina, mercaptoligantes, picolilnato e benzonitrila.** Orientador: Albérico Borges Ferreira da Silva. p.174. 2015. Tese (Doutorado) – Ciências (Físico-química). Instituto de química, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2015.

MARTINS, Roberto de A. A Descoberta dos raios X: O primeiro comunicado de Röntgen. **Revista Brasileira de Ensino de Física.** 20, p. 373-391. 1998.

MARTINS, Wilson D. **Wilhelm Conrad Roentgen e a Descoberta dos raios X.** Rev. de Clín. Pesq. Odontol., v. 1, n.3, jan./mar. 2005. Disponível em:

<http://www.imaginologia.com.br/dow/upload%20historia/Roentgen-e-a-Descoberta-dos-Raios-X.pdf>. Acesso em 03/07/2023.

PEREIRA, António M. R. **Estudo do Impacto da Descoberta dos raios x e das suas Aplicações Médicas em Portugal**. Universidade de Lisboa – Departamento de Química e Bioquímica. Lisboa, 2012.

SANTOS, E. R. **Síntese e caracterização de complexos de fórmula geral [Ru(AA)(P-P)(N-N)]PF₆, onde (AA= aminoácidos; P-P= bifosfinas; N-N= 2,2'-bipiridina e derivados e 1, 10-fenantrolina) – avaliação de suas potencialidades citotóxicas**. Orientador: Alzir Azevedo Batista. p.305. 20/06/2021. Tese (Doutorado) – Química. Departamento de química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2011.

SHELDRICK, G. M. **SHELXS-97. Program for Crystal Structure Resolution**, University of Göttingen, Göttingen, Germany (1997).

SHELDRICK, G. M. **SHELXL-97. Program for Crystal Structures Analysis**, University of Göttingen: Göttingen, Germany (1997).

ZANDONÁ, Tainara G. **Difração de raios X– uma revisão bibliográfica acerca das aplicações desta técnica na medicina**. TCC (Graduação em Física) – Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia. Uberlândia, p.28. 2021.