

# Estudo do efeito eletrônico de substituintes na liberação de NO do complexo nitrosila de rutênio $cis\text{-}[Ru(NO)(NO_2)[bpy\text{-}(X)_2](LA)_2]^{2+}$

Nathan de Sousa Ranna (PIBIC)<sup>1</sup>, Everton Tomaz da Silva (CP)<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Estudante do IFRJ/CDUC, <sup>2</sup>Docente do IFRJ/CDUC

[everton.silva@ifrj.edu.br](mailto:everton.silva@ifrj.edu.br)

O estudo do monóxido de nitrogênio (NO) possui um paradoxo histórico que remonta à nitroglicerina, substância base, tanto para a dinamite, desenvolvida por Alfred Nobel, quanto para o tratamento da *angina pectoris*, condição que afligiu Nobel em seus últimos anos de vida. Apesar dos efeitos adversos advindos do uso da nitroglicerina, seu estudo foi o precursor da busca por compostos mais seletivos e eficientes na liberação controlada de NO. O presente trabalho reside em uma das linhas de estudo de compostos liberadores de NO com enfoque específico em avaliar o potencial de complexos análogos ao  $cis\text{-}[Ru(NO)(NO_2)(bpy)(LA)_2]^{2+}$ , onde LA é o corante Laranja de Acridina, como agentes terapêuticos. A metodologia empregada baseou-se na Teoria do Funcional de Densidade (DFT) para calcular e investigar a influência de substituintes na bipyridina (bpy) sobre a ligação Ru–NO. Foram estudados dois derivados com substituintes na posição 4,4': o grupo nitrila (-CN), retirador de densidade eletrônica, e o grupo amino (-NH<sub>2</sub>), doador de densidade eletrônica, conforme valores do parâmetro de Hammett. A partir dos cálculos de otimização estrutural e frequência vibracional, foram determinadas propriedades como a Energia de Dissociação da Ligação (EDL) Ru-NO e a Afinidade Eletrônica (AE). Resultados preliminares indicam que a labilidade da ligação Ru-NO é influenciada pela natureza do substituinte na bpy. O grupo -CN enfraquece a ligação, o que se reflete em menores valores de EDL e maior AE, favorecendo a liberação de NO. Em contrapartida, o grupo -NH<sub>2</sub>, deve fortalecer a mesma ligação, aumentando a EDL e reduzindo a AE, tornando o complexo menos propenso à doação de NO. Apesar das observações, é essencial realizar cálculos com outros substituintes, a fim de estabelecer uma correlação sólida entre o efeito eletrônico do substituinte medido pelo parâmetro de Hammett, e a labilidade da ligação Ru-NO, medida pela EDL e a AE. Esperamos que isso permita a síntese racional de novos complexos com perfis de liberação de NO finamente ajustados.

**Palavras-chave:** Complexo nitrosila de Rutênio; Doadores de NO; DFT.

**Área de conhecimento:** Ciências Exatas e da Terra.

**Financiamento:** CNPq.

