

## Estrutura do triterpeno pentacíclico 30-dihidroxi-lup-20(29)-en-3-ona

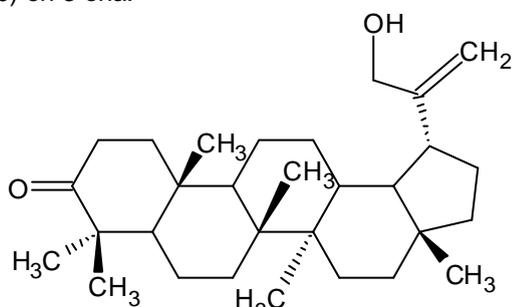
Rodrigo de S. Corrêa\* (IC)<sup>1</sup>, Sílvia Ribeiro de Souza e Silva (PG)<sup>2</sup>, Grácia Divina de Fátima Silva (PQ)<sup>2</sup>, Luiz Cláudio de Almeida Barbosa (PQ)<sup>3</sup>, Javier Ellena (PQ)<sup>4</sup>, Antônio C. Doriguetto (PQ)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Depart. de Ciências Exatas – Unifal-MG, 37130-000, Alfenas, MG; <sup>2</sup>Depart. de Química, ICEx, UFMG, 31270-901, Belo Horizonte, MG; <sup>3</sup>Depart. de Química, Universidade Federal de Viçosa, 36570-000, Viçosa, MG; <sup>4</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP, Cx. P. 369, 13560-970, São Carlos, SP. e-mail: [rodrigoquimic@yahoo.com.br](mailto:rodrigoquimic@yahoo.com.br)

Palavra chave: Triterpeno pentacíclico, estrutura cristalina, difração de raios X.

### Introdução

Os Triterpenos pentacíclicos (TTPC) compõem uma classe de compostos químicos que têm sido frequentemente isolados de espécies da família Celastraceae. A partir ramos e talos da planta *Maytenus imbricata* foi obtido a 30-dihidroxi-lup-20(29)-en-3-ona.<sup>[1]</sup>



Um fator importante para o estudo cristalográfico dos TTPC é a conformação dos anéis.<sup>[2]</sup> Pequenas diferenças conformacionais podem alterar suas propriedades físicas dificultando sua identificação por meio de técnicas espectroscópicas. Apesar do grande número de TTPC poucos possuem estrutura cristalina determinada. No banco de dados cristalográfico da Cambridge (CSD) estão depositados pouco mais de 40 estruturas de TTPC.

O objetivo do presente trabalho é descrever, pela primeira vez, a estrutura da 30-dihidroxi-lup-20(29)-en-3-ona por meio de difração de raios X (DRX).

### Resultados e Discussão

O monocristal utilizado na medida de DRX foi obtido depois de várias tentativas de cristalização. Bons monocristais foram conseguidos em clorofórmio/etanol 1:1. A medida experimental de DRX por monocristal foi realizada no difratômetro Kappa-CCD Enraf-Nonius, Mo K $\alpha$  ( $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$ ).

A estrutura cristalina foi determinada por métodos diretos e refinada por mínimos quadrados de matriz completa em F<sup>2</sup>, usando os programas SHELXS-97 e SHELXL-97, respectivamente. Os principais parâmetros cristalográficos obtidos são: Fórmula Molecular= C<sub>30</sub>H<sub>42</sub>O<sub>2</sub>; MM = 439,17; Grupo Espacial = P1; a = 9.552(5) Å, b = 9.708(5) Å, c = 14.470(5) Å;  $\alpha = 93.832(5)^\circ$ ,  $\beta = 102.834(5)^\circ$ ,  $\gamma = 103.308(5)^\circ$ ; V = 1263.3(10) Å<sup>3</sup>; Z = 2; Densidade = 1,155 Mg/m<sup>3</sup>;

29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Reflexões Coletadas = 33653; Reflexões Independentes = 6452 [R(int) = 0,0453]; Numero de Parâmetros = 596; R1[ $I > 2\sigma(I)$ ] = 0,581; wR<sup>2</sup>[ $I > 2\sigma(I)$ ] = 0,1581; R1[Total] = 0,0643; wR<sup>2</sup>[Total] = 0,1581; S = 1,067.

A estrutura cristalizou no grupo especial P1 (Fig. 1) apresentando duas moléculas na unidade assimétrica. Uma das moléculas apresentou desordem estática nos átomos de oxigênio o que provavelmente contribuiu para a quebra da simetria de inversão. Ligações de hidrogênio fracas ocorrem na direção [110] estabilizando o empacotamento cristalino.

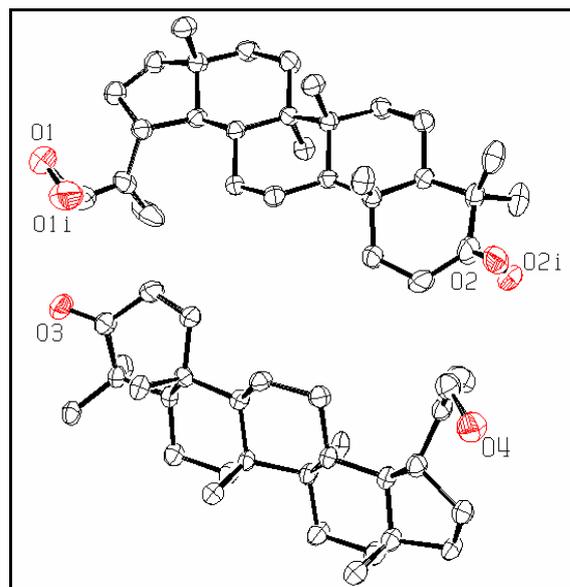


Figura 1: Representação ORTEP do composto estudado com elipsóides a 50% de probabilidade.

### Conclusão

A estrutura da 30-dihidroxi-lup-20(29)-en-3-ona foi cristalizada e determinada por DRX. A ausência de centro de inversão pode estar associado à desordem estática e às diferenças na conformação dos anéis de seis e cinco membros.

### Agradecimentos

CNPq e a FAPESP pelo apoio financeiro e ao programa PIBIC/CNPq (UNIFAL-MG) pela bolsa de IC a R. S. C.

<sup>1</sup> Souza e Silva, S. R. et al. *Helv. Chim. Acta*, **2005**, 88, 1102-1109.

<sup>2</sup> Doriguetto, A. C. et al. *Acta Cryst. E*, **2003**, 59, 164-166.