

Estudo cristalográfico da 2-tiazolidinona, 3-(4,5-dihidro-2-tiazolil) hidrogenosulfato monohidratado

Rodrigo de Souza Corrêa* (IC)¹, Márcia P. Veloso (PQ)², Marcelo H. dos Santos (PQ)², Javier Ellena (PQ)³, Antônio C. Doriguetto (PQ)^{1,2}

¹ Laboratório de Cristalografia, Depart. de Ciências Exatas – Unifal-MG; ² LABFARMACO, Depart. de farmácia - Unifal-MG, Rua Gabriel Monteiro da Silva, 714, CEP 37130-000, Alfenas, MG; ³ Instituto de Física de São Carlos - USP, CEP 13560-970, São Carlos, SP; e-mail: rodrigoquimic@yahoo.com.br

Palavras Chave: Tiazolidinona, difração de raios X, Interações moleculares.

Introdução

As tiazolidinonas são substâncias que vêm recebendo atenção especial devido à grande importância biológica, principalmente quando se trata de atividades antimicrobianas.^[1,2] Com isso estudos relacionados à síntese dessa classe de compostos vêm sendo frequentemente realizados. A técnica de difração de raios X (DRX) é uma das técnicas mais utilizadas para a determinação estrutural inequívoca de substâncias e além disso, continua sendo a melhor técnica para se determinar sua química supramolecular ou a presença de polimorfismo.^[3]

Nesse sentido, o objetivo do presente trabalho é apresentar o estudo cristalográfico (síntese e caracterização estrutural) do heterociclo tiazolidinona, 2-tiazolidinona, 3-(4,5-dihidro-2-tiazolil) hidrogenosulfato monohidratado.

Resultados e Discussão

A síntese procedeu-se de acordo com a metodologia descrita por Hanefeld & Gunes.^[4] Monocristais utilizados no experimento de DRX foram obtidos após recristalização em éter etílico. A estrutura cristalina foi determinada por métodos diretos e refinada por mínimos quadrados de matriz completa em F², usando os programas SHELXS-97 e SHELXL-97, respectivamente. Os principais parâmetros cristalográficos obtidos são: Grupo Espacial = P2₁2₁2₁; a = 5,8508(2) Å, b = 13,0999(4) Å, c = 15,4187(5) Å; α = β = γ = 90,00°; V = 1181,76(7) Å³; Z = 4; Densidade = 1,711 Mg/m³; Reflexões Coletadas = 12018; Reflexões Independentes = 2057 [R(int) = 0,0484]; Número de Parâmetros = 166; R1[|I>2σ(I)|] = 0,0322; wR²[|I>2σ(I)|] = 0,0789; R1[Total] = 0,0377; wR²[Total] = 0,0830; S = 1,053.

A unidade assimétrica é mantida por interações intermoleculares iônica fortes e também por uma ligação de hidrogênio (N2-H2...O2) com magnitude de 1,978 Å (Fig. 1). Observa-se também uma ligação de hidrogênio entre o hidrogenosulfato e uma água de cristalização (O3-H1...O6) com aproximadamente 1,913 Å a qual é de extrema importância para a estabilidade do empacotamento cristalino (ligações inter-moleculares).

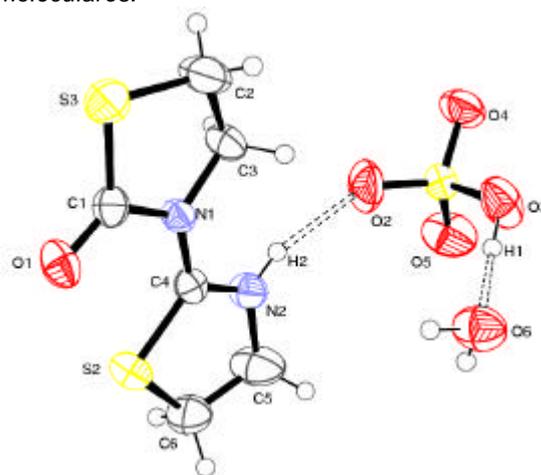


Figura 1: Representação ORTEP-3 do composto estudado com elipsóides a 50% de probabilidade.

Os parâmetros intra-moleculares tais como comprimentos e ângulos de ligação estão dentro dos valores esperados. Destacam-se os comprimentos C1-N1 e C4-N2 com valores de 1,410 Å e 1,304 Å, respectivamente, o que evidencia um caráter de ligação dupla em C4-N2 fazendo com que o próton H2, ligado a N2, torna o confira uma carga positiva ao nitrogênio. A entrada do ânion hidrogenosulfato no retículo cristalino garante a neutralidade do composto.

Conclusões

A estrutura cristalina do heterociclo tiazolidinona, 2-tiazolidinona, 3-(4,5-dihidro-2-tiazolil) hidrogenosulfato monohidratado foi determinada por meio da técnica de difração de raios X. A presença da água e do hidrogenosulfato são fundamentais para estabilizar da rede cristalina.

Agradecimentos

Ao CNPq, FINEP e FAPEMIG. Ao PIBIC/CNPq pela bolsa de IC à RSC.

¹ Xu, X. *et al. Journal of fluorine chemistry*, **2004**, 125 1159-1162.

² Shimizu, S., *et al. Pancreatology* **2002**, 2, 217-361.

³ Corrêa, R. S., *et al. Acta Cryst. C*. **2006**, 62, p. o115-o117.

⁴ Hanefeld, W.; Gunes, Z. E. *Arch. der Pharmazie* **1986**, 319(6), 521-7.