

Determinação da Estrutura Cristalina e Molecular da 3-Iodo-Beta-Lapachona

Marconi Galileu de A Teixeira (IC)^{1*}, Mariano Alves Pereira (PQ)¹, Valeria Rodrigues dos S. Malta(PQ)¹, Givanildo do Santos Silva (PG)¹, Marília Oliveira Fonseca Goulart (PQ)², Nadja Maria Fernandes Lima (PG)². (*marconigalileu@hotmail.com)

¹Laboratório de Cristalografia e Modelagem Molecular (LabCrimM), ²Laboratório de Eletroquímica. Instituto de Química e Biotecnologia (IQB), Universidade Federal de Alagoas (UFAL), Campus A.C.Simões BR 104 Norte Km 97 Tabuleiro do Martins 57072-970 Maceió-AL, Brasil.

Palavras Chave: Lapachol, Monocristal, Difração de Raios X.

Introdução

O Lapachol, composto orgânico da classe 1,4 naftoquinona, além de possuir atividades farmacológicas diversas (antimicrobiana e antiinflamatória, entre outras) também constitui matéria prima para a síntese de outras quinonas naturais do mesmo grupo e que são potencialmente ativas, mas de ocorrência natural rara. Essas potencialidades impulsionaram diversos cientistas na busca de derivados desse composto com semelhanças na atividade microbiológica. Um deles é o 3-Iodo-Beta-Lapachona, composto obtido sinteticamente¹. As betas lapachonas são naftoquinonas do tipo 1,2 que possuem um anel pirano ligado ao biciclo naftoquinônico. Visando a obtenção de dados que elucidassem as propriedades farmacodinâmicas, foi realizada a análise cristalóquímica do composto em questão.

Resultados e Discussão

A coleta de dados foi realizada à temperatura ambiente (T = 298K), por meio de um difratômetro automático Kappa CCD², utilizando radiação monocromática, MoK α , (λ = 0,71073 Å). Os principais dados cristalográficos são: sistema cristalino monoclinico, grupo espacial P2₁/c, a = 12,2739 (3) Å, b = 8,1762 (2) Å e c = 14,3955(3) Å; β = 107,2260(10)⁰ Z = 4, V = 1380,23 Å³ e F(000) = 719,9. Foram coletadas 3.159 reflexões independentes com R(int) = 0,0584. A estrutura cristalina foi resolvida por métodos diretos e refinada anisotropicamente pelo método dos mínimos quadrados³, com matriz completa de F². O modelo final apresenta um índice de discordância de 0,0393 e S = 1,029.

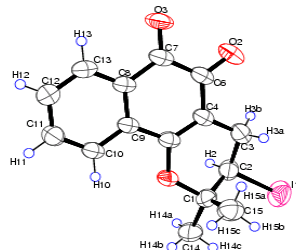


Figura 1. Representação ORTEP da 3-Iodo-Beta-Lapachona com os átomos identificados e fator de vibração térmica a 50 % de probabilidade⁴

Conclusões

Os valores médios para distância [1,385(5)] Å e ângulo [120⁰] no anel benzênico estão dentro do limite esperado. No anel quinônico, ligação simples C₇-C₆ apresenta valor maior [(1,532(5) Å).] devido provavelmente à repulsão entre os dipolos das carbonilas. As demais são ligeiramente encurtadas em função da presença de ligações duplas vizinhas. As carbonilas apresentam, dentro do erro experimental, valores idênticos para suas distâncias de ligação. C₄-C₅=1,355(5) Å e C₉-C₈=1,404(4) Å, são ligações duplas de tal anel. O biciclo naftoquinônico é planar e as duas carbonilas, bem como os átomos C₃ e O₁ do anel pirano, acompanham o plano do biciclo em questão [O₃-C₇-C₆-O₂=178.0(3)⁰; O₁-C₅-C₄-C₆= 179.2(3)⁰; O₂-C₆-C₄-C₃=-1.0(5)⁰]. O anel pirano apresenta conformação de meia-cadeira distorcida com os átomos C₂ e C₁ fora do plano formado pelos outros quatro átomos do referido anel [(O₁-C₅-C₄-C₃=2.8(5)⁰] As quatro moléculas são mantidas na cela unitária por interações secundárias que apresentam os seguintes valores: O3⁽ⁱ⁾...H2 = 2.40 Å; O3⁽ⁱ⁾...C2 = 3.341(3) Å; C2 - H2 = 0.98 Å; O3⁽ⁱ⁾...H2 - C2⁽ⁱ⁾ = 162⁰. O2⁽ⁱⁱ⁾... H10 = 2.55 Å; O2⁽ⁱⁱ⁾... C10 = 3.438(4) Å; C10 - H10 = 0.93 Å; O2⁽ⁱⁱ⁾... H10 - C10 = 159⁰. O3⁽ⁱⁱⁱ⁾... H11 = 2.46 Å; O3⁽ⁱⁱⁱ⁾... C11 = 3.264(4) Å; C11 - H11 = 0.93 Å; O3⁽ⁱⁱⁱ⁾... H11 - C11 = 144⁰ {[i] = (-x, 1/2 + y, 1/2 - z); [ii] = (x, 1 + y, z)}.

Agradecimentos

UFAL, CAPES, FAPEAL e CNPQ

¹. LIMA, Nadja Maria Fernandes. Hidroxiquinonas e Derivadas. Síntese e Avaliação de atividades Biológicas. Estudos Eletroquímicos na Verificação do Mecanismo Transferência Eletrônica-Estresse Oxidativo. Tese (Doutorado em Química e Biotecnologia) Centro de Ciências Exatas e Naturais do Departamento de Química da Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2005.

². Nonius (1997 - 2000). COLLECT. Nonius BV, Delft, The Netherlands.

³. Sheldrick, G.M. (1997). SHELX97 Program for the Solution and Refinement of Crystal Structures. University of Göttingen. Germany.

⁴. L. J. Farrugia, J. Appl. Crystallogr. 30 (1997) 565.