

# Estrutura Cristalina de 4,5-diidro-6,6-dimetil-6H-2-(fenil)-pirano[b-4,3]-nafto[1,2-d]imidazol (NPPN-3073)

José Atalvanio da Silva<sup>1</sup>(PG)\*, Valéria Rodrigues dos Santos Malta<sup>1</sup>(PQ), Antônio Ventura Pinto<sup>2</sup> (PQ).  
Mariano Alves Pereira<sup>1</sup>(PQ) *atalvanio@yahoo.com.br*.

1- Instituto de Química e Biotecnologia, Universidade Federal de Alagoas, 57092-970, Maceió, AL, Brasil

2- Núcleo de Pesquisas em Produtos Naturais, CCS, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21944-970, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Palavras-chave: naftoquinonas, difração de raios X e cristal.

## Introdução

As quinonas formam um grupo de compostos com dois grupos carbonila adjacentes ou separados, com anéis de seis membros insaturados<sup>1</sup>. As naftoquinonas são quinonas derivadas do naftaleno pela condensação de dois anéis benzênicos, os quais são compostos coloridos devido à presença de ligações conjugadas. A amostra da substância para estudo faz parte de um grupo de compostos com núcleo quinoidal, sintetizadas pelo NPPN-UFRJ. A amostra denominada, NPPN-3073, foi submetida à análise via difração de raios X, utilizando-se um difratômetro automático Kappa CCD e em seguida foi realizado a resolução e o refinamento da estrutura utilizando o programa WinGX<sup>2,3</sup>.

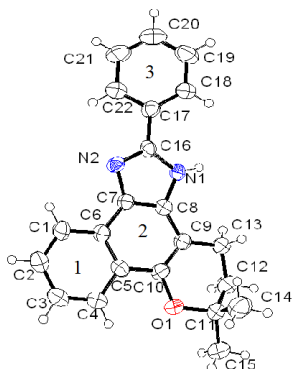


Figura 1. Representação ORTEP do NPPN-3073.

## Resultados e discussão

Os principais parâmetros cristalinos da célula unitária, bem como outros dados relevantes obtidos na resolução estrutural são: radiação (MoK $\alpha$ ) = 0,71073 Å, T = 298K, sistema cristalino monoclinico, grupo espacial P2<sub>1</sub>/a, a = 9,0547(2) Å, b = 10,5956(5) Å, c = 18,7071(10) Å;  $\beta$  = 102,467(3)°, Volume = 1752,44 Å<sup>3</sup>; Z = 4 e F(000) = 688; R(obs) = 0,1506 e S = 1,1340. Foram coletadas 4167 reflexões independentes com R(int) = 0,1179. A estrutura cristalina foi resolvida por métodos diretos e refinada pelo método dos mínimos quadrados<sup>(2)</sup>, com matriz completa de F<sup>2</sup>.

## Conclusão

Os valores médios dos comprimentos de ligação dos anéis benzênicos 1, 2 e 3 são, respectivamente,

1,395(9)Å, 1,4115(8)Å e 1,377(9)Å e os ângulos interatômicos para os anéis 1 e 3 apresentam um valor médio de 120°, ou seja, os valores médios para os anéis benzênicos estão portanto dentro do limite esperado. O anel 2 está distorcido devido a vizinhança do anel imidazol, levando a alterações nos ângulos interatômicos. Esta distorção pode ser verificada nos ângulos C5-C6-C7 = 116,1(5)°, C9-C8-C7 = 124,9(5)° e C10-C9-C8 = 114,6(5)°. No anel pirano as ligações simples O1-C10 = 1,384(7)Å e O1-C11 = 1,457(7) Å apresentam um encurtamento devido a presença do oxigênio. No anel imidazol a ligação dupla está bem estabelecida entre N2 e C16 [1,317(7)Å]. Os anéis benzênicos e imidazólico são planares. O anel pirano apresenta conformação de meia cadeira distorcida com os átomos C11 [-0,312 Å] e C12 [0,330 Å] fora do plano formado pelos outros quatro átomos do referido anel [O1, C10, C9 e C13]. Analisando o empacotamento cristalino, verifica-se que as moléculas são mantidas no retículo cristalino através de uma ligação de hidrogênio clássica e interações secundárias que apresentam os seguintes valores: **N(1) – H(1N) ...N(2)** [ N(1)-H(1N) = 0,89(1) Å, H(1N) ...N(2) = 2,13(6) Å, N(1) ...N(2) = 3,010 Å, N(1) – H(1N) ...N(2) = 170(5)° ] ; **C(4) – H(4) ...O(1)**<sup>ii</sup> [ C(4) – H(4) = 0,93 (7), H(4) ...O(1) = 2,429(4), C(4) ...O(1) = 2,754(8), C(4) – H(4) ...O(1) = 100,5(4)° ] e **C(13) – H(13B) ...N(1)**<sup>iii</sup> [C(13)-H(13B) = 0,970(6)Å, C(13) ...N(1) = 3,796(7)Å, H(13B) ...N(1) = 2,955(4), C(13) -H(13B) ...N(1) = 145,65(4). {i = -1/2 + x, 3/2 – y, z; ii = x, y,z; iii = x-1/2,-y-1/2,+z}. Como se pode observar o R(int) apresenta um valor elevado (0,1179) indicando que o cristal não era de boa qualidade. Consequentemente, após a resolução estrutural o índice de discordância também apresentou um valor elevado (0,1506). No entanto, a amostra está sendo recristalizada com o objetivo de obter um monocristal de melhor qualidade e realizar uma nova coleta.

## Agradecimentos

CNPq UFAL FAPEAL

<sup>1</sup>Ikkan, R. **Natural Products**. A Laboratory Guide. New York: Institut fur Anorganische Chemie der Universitat, Göttingen. Germany, Tammanstrasse 4, (1991).

<sup>2</sup>Sheldrick, G.M. (1997). SHELX97 Program for the Solution and Refinement of Crystal Structures. University of Göttingen. Germany.

<sup>3</sup>Farrugia, L. S.-WinGX. J.Appl.Cryst.(1999),32,837-838.