

Determinação da estrutura cristalina e molecular da 5,6 – difenil – diidro – piran – 2,4 - diona

Mariano A. Pereira¹ (PQ)*, Laura C. Souza (PQ)², Dennis O. Imbroisi (PQ)², Carlos A. De Simone¹ (PQ) e Valéria R.S. Malta¹ (PQ), Givanildo S. da Silva (PG)¹. (*map@qui.ufal.br).

¹Laboratório de Cristalografia e Modelagem Molecular (LabCriMM), ²Laboratório de Síntese Orgânica (LaSO), 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: Pironas, difração de raios X.

Introdução

As pironas pertencem à classe de compostos heterocíclicos de seis membros que contém um átomo de oxigênio e são de interesse nos estudos de novos fármacos, devido ao fato de alguns de seus derivados apresentarem atividade antimoluscicida e antioxidante¹. O Laboratório de Síntese Orgânica do Instituto de Química e Biotecnologia da UFAL, vem desenvolvendo atividades de pesquisa visando obter derivados pirânicos que sejam, sob o aspecto farmacológico, potencialmente ativos. Após a obtenção de tais compostos, foi realizado um estudo cristalográfico visando validar a sua síntese e obter um conjunto de dados relevantes numa análise químico-farmacológica. Através dos dados de intensidade dos feixes de raios X difratados pela amostra em questão é possível propor um modelo estrutural quimicamente coerente e que possa fornecer dados de importância capital para a predição de suas propriedades.

Resultados e Discussão

Os dados foram coletados à temperatura ambiente (T = 298K), por meio de um difratômetro Kappa CCD Enraf Nonius², utilizando radiação monocromática, MoK α , (λ = 0,71073 Å). Os principais dados cristalográficos são: grupo espacial P2₁/c, sistema cristalino monoclínico, a = 8,9939(2) Å, b = 8,2312(4) Å, c = 18,9044(8); β = 101,412(2)⁰, Z = 4, V = 1371,84(9) Å³ e F(000) = 560. Foram coletadas 5298 reflexões sendo 3.113 independentes com [R(int) = 0,0172]. A estrutura cristalina foi resolvida usando métodos diretos e refinada anisotropicamente pelo método dos mínimos quadrados³. R_{obs} = 0,050 e S = 1,05

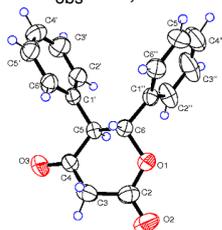


Figura 1. Representação ORTEP3 da molécula título com os átomos identificados e fator de vibração térmica a 50% de probabilidade³.

32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Conclusões

Os anéis fenílicos apresentam 1,380 Å e 120° para medidas de distâncias e ângulos médios de ligação, respectivamente e, portanto, dentro dos valores esperados para este tipo de anel. Suas conformações são, dentro do erro experimental, planares. O anel lactônico mostra-se numa conformação de meia cadeira distorcida com os átomos C₆, O₁, C₂ e C₃ formando a base da cadeira, uma vez que o ângulo de torção envolvendo tais átomos é de 2,1°. O átomo O₂ da carbonila acompanha o referido plano, uma vez que dista 0,012 Å do mesmo e apresenta -177,8° para o ângulo torsional envolvendo O₂, C₂, O₁ e C₆. No entanto, os átomos C₄ e C₅ estão abaixo do plano em questão pois estão a 0,080 e -1,102 Å do mesmo e apresenta o ângulo de torção O₁-C₆-C₅-C₄ de -21,1°. Os átomos C₅ e C₆ acompanham os planos médios que passam pelos anéis fenílicos a que estão associados com ângulos de torção C₅-C₁'-C₆'-C₅' e C₆-C₁'-C₂'-C₃' com valores de 179,5 e 176,9°, respectivamente. As quatro moléculas são mantidas na cela unitária por interações secundárias que apresentam os seguintes valores: O2⁽ⁱ⁾...H5 = 2.49 Å; O2⁽ⁱ⁾...C5ⁱⁱ = 3.361(3) Å; C5ⁱⁱ - H5ⁱⁱ = 0.92 Å; O2⁽ⁱ⁾...H5ⁱⁱ - C5⁽ⁱⁱ⁾ = 156°. O3⁽ⁱⁱⁱ⁾...H12 = 2.54 Å; O3⁽ⁱⁱⁱ⁾...C3 = 3.433(2) Å; C3 - H12 = 0.99 Å; O3⁽ⁱⁱⁱ⁾...H12 - C12 = 150°. O3⁽ⁱⁱⁱ⁾...H15 = 2.42 Å; O3⁽ⁱⁱⁱ⁾...C6 = 3.380(2) Å; C6 - H15 = 0.99 Å; O3⁽ⁱⁱⁱ⁾...H15 - C6 = 161° {[i] = (x, 5/2 - y, 1/2 + z); [ii] = (-x, 1/2 + y, 1/2 - z)}.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPEAL e Finep.

¹Sousa.L.C. – Síntese e Avaliação das Atividades Antiúlcera e Moluscicida da 5,6-Dimetil-Diidro-Piran-2,4 Diona e Análogos 6 Substituídos. Dissertação de Mestrado, DQ/UFAL (2002).

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

³Sheldrick, G.M. (1997). Shelxs-97; Shelxl-97. Program for Solution and Refinement of Crystal Structures. University of Göttingen, Germany.

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