Determinação da estrutura molecular e supramolecular de benzofenonas poli-hidroxiladas

Iara M. Landre Rosa[1]*(IC), Talita E. Souza (IC), Rodrigo S. Corrêa (PG)[2], Javier Ellena (PQ)[2] , Antônio C. Doriguetto[1](PQ)

iara_landre@yahoo.com.br

[1] Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal de Alfenas, Alfenas – MG, 37130-000; [2] Instituto de Física de São Carlos - USP, Cx. P. 369, CEP 13560-970, São Carlos, SP.

Palavras Chave: *Hidroxibenzofenona, difração de raios X, estrutura cristalina.*

Introdução

Hidroxibenzofenonas são cetonas aromáticas com hidroxilas como grupos substituintes. Muitas de suas propriedades estão relacionadas ao arranjo cristalino e às interações inter e intramoleculares. Estas substâncias combinam elevada absorção na faixa do UV e uma excelente fotoestabilidade[1]. Como os substituintes são responsáveis por diversas características e as ligações de hidrogênio existentes desempenham papel importante, é de fundamental importância que se determine a estrutura molecular e supramolecular de tais moléculas. Nesse trabalho reportamos a estrutura cristalina de (I) 3,4-diidroxibenzofenona, (II) 3-hidroxibenzofenona e (III) 2,2',4,4'-tetraidroxibenzofenona.

Resultados e Discussão

Os cristais de (I), (II) e (III) foram obtidos a partir da recristalização em soluções de metanol pelo método de evaporação lenta do solvente a temperatura ambiente. As análises de difração de raios X foram realizadas à temperatura ambiente, utilizando o difratômetro Enraf-Nonius Kappa-CCD e radiação MoKα (λ = 0,71073 Å). As estruturas foram resolvidas por meio de métodos diretos e refinadas por meio de mínimos quadrados de matriz completa. Os principais dados cristalográficos são mostrados na Tabela 1 e as representações da estrutura cristalina na Figura 1.

Tabela 1. Dados cristalográficos de (I), (II) e (III)

	(I)	(II)	(III)
Formula	$C_{13}H_{10}O_3$	$C_{13}H_{10}O_2$	$C_{13}H_{10}O_5{\cdot}H_2O$
Massa Molec.	214,21	198,21	246,21
G. Espacial	C2/c	$P2_1/n$	C2/c
Sist. Cristal.	Monoclínico	Monoclínico	Monoclínico
a / Å	24,5154(8)	4,0654(2)	15,139(5)
b / Å	7,5640(3)	20,227(1)	7,763(5)
c / Å	12,4729(3)	11,8012(4)	11,069(5)
β / º	115,195(2)	91,044(3)	100,628(5)
Volume / Å³	2092,9(1)	970,28(8)	1278,6(11)
Z	8	4	4
Densid./mg m^{-3}	1,360	1,357	1,279
R1	0,0845	0,0586	0,0496
wR2	0,1418	0,1305	0,1186

Na estrutura (I) os comprimentos de ligação C(1)–C(7) e C(7)=O(1) e a planaridade dos anéis são afetados principalmente pelo efeito de ressonância criada pela presença da hidroxila em posição *para* que permite a existência de um tautomerismo ceto-enólico. O empacotamento apresenta três ligações de hidrogênio intermoleculares e uma intramolecular, entre as hidroxilas presentes, além de uma interação π…π entre os anéis A. Já em (II) as ligações não são afetadas por ligações de hidrogênio ou pelos substituintes. O empacotamento apresenta uma ligação de hidrogênio intermolecular que une as moléculas em uma cadeia infinita do tipo cabeça-cauda. Em (III), os comprimentos das ligações C(1)–C(7) e C(7)=O(1) são afetados devido a presença das ligações de hidrogênio intramoleculares. Essa ligação intramolecular pode ser verificada também pelo do ângulo entre os planos que passam nos anéis, que é 35.40º, enquanto que (I) e (II) apresentam ângulos iguais a 50,02º e 52,05º, respectivamente. O empacotamento apresenta três ligações de hidrogênio intermoleculares e uma intramolecular entre o grupo hidroxila e a carbonila. Deve-se enfatizar que já está reportada na literatura a estrutura do polimorfo anidro de (III)[2]. Ou seja, no presente trabalho foi determinada a forma mono-hidratada 2,2',4,4'-tetraidroxibenzofenona.

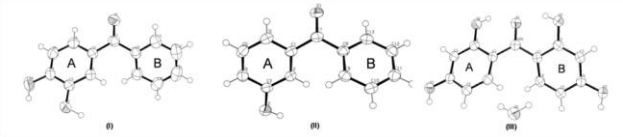

Figura 1. Representação ORTEP de (I), (II) e (III).

Conclusões

Neste trabalho foi determinada a estrutura de três hidroxibenzofenonas: (I), (II) e (III). Suas geometrias intra e intermoleculares foram estudadas e comparadas em termos de efeitos estéricos, indutivos e supramoleculares. Foi cristalizado e caracterizado um novo polimorfo da 2,2',4,4'-tetraidroxibenzofenona.

Agradecimentos

CNPq, PIBIC/CNPq-Unifal-MG, FAPEMIG e CAPES pelo apoio financeiro.

[1] B. W. Liebich (1979), Acta Cryst. B35, 1186 – 1190
[2] E. O. Schlemper (1982), Acta Cryst. B38, 554 – 559.