

Determinação Estrutural de Naftotriazóis Derivados de Carboidratos, por Difração de raios X

Caroline F. J. Franco (IC)¹, Alessandro K. Jordão (PG)¹, Maria Cecília B. V. de Souza (PQ)¹, Vitor F. Ferreira(PQ)¹, Angelo da C. Pinto (PQ)³, Anna Claudia Cunha(PQ)^{1*}, Jackson A. L. C. Resende (PQ)^{2*}

e-mail: jresende@vm.uff.br

¹Universidade Federal Fluminense, Departamento de Química Orgânica, Programa de Pós-Graduação em Química, Outeiro de São João Batista, 24020-141 Niterói, RJ, Brasil; ²Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Departamento de Química Inorgânica, Campus Valonguinho, CEP 24020-141, Niterói, RJ; ³Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica, Cidade Universitária, Bloco A- CT, Lab 621, Ilha do Fundão, 21945-970, Rio de Janeiro.

Palavras Chave: Naftotriazóis, difração de raios x, estrutura cristalina

Introdução

Durante os últimos anos, as técnicas de RMN aplicadas à elucidação estrutural de compostos orgânicos têm alcançado um altíssimo grau de sofisticação. Apesar dos recentes avanços tecnológicos em RMN, a literatura¹ mostra vários exemplos de substâncias nos quais a elucidação completa de maneira inequívoca só foi possível através da técnica de difração de raios X. Dentro deste contexto, esta ferramenta tem sido extremamente valiosa para os químicos e bioquímicos, tendo em vista que é capaz de caracterizar completamente uma dada estrutura, permitindo sua descrição precisa em termos de disposição relativa de grupos de átomos, ângulos de ligação, além de ângulos de torção (ou ângulos diedro) que definem sua conformação. Este trabalho visa à determinação por difração de raios X das estruturas cristalinas dos compostos 1-(metil 5'-desoxi-2',3'-O-isopropilideno-β-D-ribofuranosid-5'-il) -1H-nafto[2,3-d][1,2,3]triazol-4,9-diona **1a** e 1-(6'-desoxi-1',2':3',4'-di-O-isopropilideno-D-galactopiranos-6'-il)-1H-nafto[2,3-d][1,2,3]triazol-4,9-diona **1b**, dos quais destaca-se composto **1b**, que apresentou atividade *in vitro* contra alguns tipos de células cancerígenas.

Resultados e Discussão

Os cristais de **1a** e **1b** foram obtidos a partir da recristalização em acetonitrila, pelo método de evaporação lenta do solvente a temperatura ambiente. As análises de difração de raios X foram realizadas à 298 K, utilizando o difratômetro 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 estão discriminados na Tabela 1. As estruturas cristalinas dos compostos **1a** e **1b** estão apresentadas na Figura 1. O empacotamento cristalino do composto **1a** é mantido por interações fracas na direção (110), do tipo C_{sp2}-H...O. O anel

diidrofuranico apresenta conformação envelope ^oE e o anel 1,3-dioxolano é plano.

No empacotamento cristalino de **1b** foi observado uma molécula de acetonitrila, que é mantida por interações fracas do tipo C-H...O e C-H...N. A conformação do anel pirânico foi definida como bote torcido, enquanto os dois anéis 1,3-dioxolano apresentaram a conformação envelope ^oE.

Tabela 1: Dados de cristalografia dos naftotriazóis **1a** e **1b**.

Naftotriazol	1a	1b
Fórmula	C ₁₉ H ₁₉ N ₃ O ₆	C ₂₂ H ₂₃ N ₃ O ₇ ·C ₂ H ₃ N
Massa Molecular	385.37	482.49
Grupo de Espaço	P2 ₁	P2 ₁
Sist. Cristal.	Monoclínico	Monoclínico
a / Å	5.8100 (12)	11.444 (2)
b / Å	5.9825 (12)	8.7002 (17)
c / Å	25.597 (5)	12.013 (2)
β / °	90.82 (3)	95.29 (3)
Volume / Å ³	889.6 (3)	1191.0 (4)
Densidade/g cm ⁻³	1.439	1.345
R1	0,0779	0,0298
WR2	0,2207	0,0680

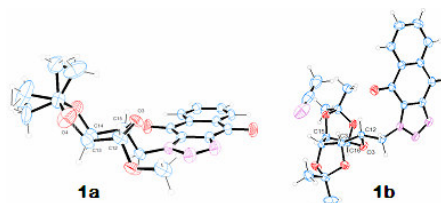


Figura 1: Representação ORTEP dos naftotriazóis

Conclusões

O estudo possibilitou a caracterização das estruturas dos naftotriazóis **1a** e **1b**, o que possibilitará uma melhor interpretação de seus resultados de atividade biológica.

Agradecimentos

FAPERJ-PRONEX, CNPq-PIBIC e Programa de PG em Química da UFF.

¹ Cunha, S., *Quim. Nova*, **2008**, 31, 906-909.