

## Estrutura Cristalina e Estudo Teórico do N-metil-amino-norlapachol

Lucas Emanuel do N. Aquino (IC)<sup>1</sup>, Jademilson Celestino dos Santos (PG)<sup>1</sup>, Valéria R. dos Santos Malta (PQ)<sup>1\*</sup>, Mariano Alves Pereira (PQ)<sup>1</sup>, José Adonias Alves de França (PG)<sup>2</sup>, Meire dos Santos Falcão de Lima (IC)<sup>2</sup>, Celso de Amorim Câmara (PQ)<sup>2</sup>, Kátia Maria Honório (PQ)<sup>3</sup>. email: vrs@qui.ufal.br

<sup>1</sup> Laboratório de Cristalografia e Modelagem Molecular (LabCrMM), Instituto de Química e Biotecnologia, Universidade Federal de Alagoas (UFAL), Campus A.C.Simões, Br 104-Norte, Km 97, Tabuleiro dos Martins CEP 57072-970, Maceió-Al, Brasil

<sup>2</sup> Departamento de Química, Universidade Federal Rural de Pernambuco, Rua Dom Manoel de Medeiros s/n Dois Irmãos, 52171-900, Recife, Brasil.

<sup>3</sup> Escola de Artes, Ciências e Humanidades, Universidade de São Paulo, Avenida Arlindo Bettio, 1000, Ermelino Matarazzo, 03828-000, São Paulo, Brasil

Palavras Chave: n-metil-amino-norlapachol, esquistossomose, cristalografia de raios X, dados cristalográficos, DFT.

### Introdução

A busca por moluscicidas é de grande interesse para o controle biológico de doenças parasitárias, em especial a esquistossomose. Derivados do lapachol, uma naftoquinona facilmente extraída de um grande número de espécies da *Tabebuia* sp. (Bignoniaceae)<sup>1</sup>, são bastante conhecidos por suas características terapêuticas, das quais pode-se destacar a atividade moluscicida<sup>2</sup>. O N-metil-amino-norlapachol é um derivado do norlapachol que está sendo submetido a ensaios biológicos, com o objetivo de testar sua atividade moluscicida. Sua estrutura foi determinada utilizando a Cristalografia de raios X. Outros dados estruturais foram obtidos utilizando o método da teoria do funcional da densidade (DFT).

### Resultados e Discussão

Os dados foram coletados utilizando-se um Difratômetro Automático Kappa CCD. Após a coleta dos dados e a posterior determinação estrutural, obteve-se os seguintes dados cristalográficos: sistema cristalino triclinico, grupo espacial  $P\bar{1}$ ,  $a = 7.1759(2)$  Å,  $b = 7.8601(2)$  Å,  $c = 11.5692(2)$  Å,  $\alpha = 101.0450(10)^\circ$ ,  $\beta = 89.2980(10)^\circ$ ,  $\gamma = 93.6540(10)^\circ$ ;  $V = 639.15(3)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $F(000) = 254$ ,  $R1 = 0.0538$ ,  $S = 0.941$ . Foram coletadas 3049 reflexões independentes com  $R(int) = 0.0680$ .

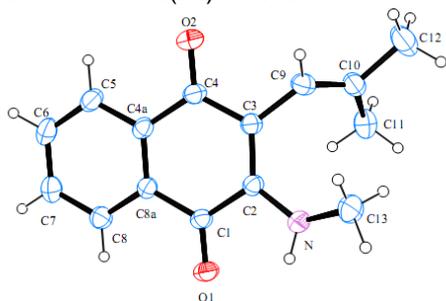


Figura 1. Representação ORTEP do N-metil-amino-norlapachol.

33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Na tabela 1, encontram-se as energias total para as estruturas cristalográfica e otimizada, obtidas por DFT. Observa-se que a estrutura otimizada possui menor energia do que a cristalográfica, sendo, portanto, mais estável. A figura 2 representa a sobreposição entre as duas estruturas. Analisando a figura, verifica-se que ambas as estruturas são similares, diferindo apenas na posição dos grupos metil.

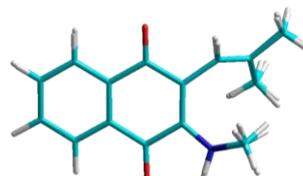


Figura 2. Superposição entre as estruturas otimizada e cristalográfica do N-metil-amino-norlapachol.

Tabela 1. Energias total das estruturas cristalográfica e otimizada do N-metil-amino-norlapachol.

	Estrutura Cristalográfica	Estrutura Teórica
$E_t$ (kcal/mol)	-492623.4232	-492796.5000

### Conclusões

Analisando os dados estruturais (comprimentos e ângulos interatômicos, torção etc.) verifica-se que os mesmos estão de acordo com os valores experimentais encontrados na literatura. Vale ressaltar que cálculos de outras propriedades físico-químicas estão sendo efetuados.

### Agradecimentos

CNPq CAPES UFAL FAPESP

<sup>1</sup> Barbosa, P.T.; Camara, C.A.; Silva, T.M.S.; Martins, R.M.; Pinto, A.C.; Vargas, M.D. *Bioorg. Med. Chem.* 13 (2005) 6464.

<sup>2</sup> Lima, N.M.F.; Santos, A.F.; Porfírio, Z.; Goulart, M.O.F.; Sant'ana, A.E.G. *Acta Trop.*, 2002, 83, 43.