

# Síntese e cristalquímica do ligante 1-(4-acetilfenil)-3-(4-amidofenil)triazeno.

Augusto G. O. de Freitas<sup>1</sup> (PG)\*, Cristiano Giacomelli (PQ)<sup>1</sup>, Gustavo L. Paraginski<sup>2</sup> (PG), Claiton R. Berticelli<sup>2</sup> (PG), Manfredo Hörner<sup>2</sup> (PQ)<sup>†</sup>.

\*ago\_freitas@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Laboratório de Polímeros e Colóides – Dep. de Química – Universidade Federal de Santa Maria – Santa Maria/RS.

<sup>2</sup>Núcleo de Investigação de Triazenos e Complexos - NITriCo – Dep. de Química – UFSM – Santa Maria/RS.

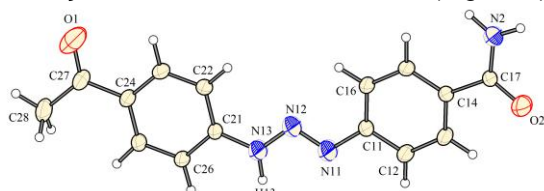
Palavras Chave: difração de raios-X, triazenos, estrutura cristalina

## Introdução

Compostos triazenos pertencem a família das moléculas nitrogenadas de cadeia aberta apresentando três átomos de nitrogênio ligados em seqüência<sup>1</sup>. Estes compostos apresentam uma diversificação de aplicação, principalmente atividade biológica envolvendo citotoxicidade contra células cancerígenas, clivagem de DNA plasmidial e atividade antibacteriana<sup>2,3</sup>. Com base nestas propriedades, relatamos neste trabalho a síntese e análise estrutural do composto 1-(4-acetilfenil)-3-(4-amidofenil) triazeno **1**.

## Resultados e Discussão

O composto **1** é obtido a partir da reação de diazotização em meio ácido da 4-aminobenzamida com nitrito de sódio, a 0 °C, na proporção de 1:1 n/n, seguido do acoplamento da 4-aminoacetofenona. A estrutura de **1** foi determinada por difração de raios-X em monocristal (Figura 1).



**Figura 1.** Projeção da estrutura cristalina de **1** com elipsóides térmicos em nível de probabilidade de 50%.

A molécula estabelece um arranjo supramolecular 2-D, no qual dímeros centrosimétricos se relacionam através de um eixo axial de rotação-translação  $2_1$  paralelo à direção cristalográfica [010]. O arranjo bidimensional se concentra no plano de rede (103) e é descrito pelos vetores-base [010] e [301]. A Figura 2 ressalta a projeção da rede 2-D levemente inclinada em relação à direção [001], destacando a orientação do plano (103) coincidindo com o plano do papel. A Tabela 1 apresenta os dados geométricos das ligações de hidrogênio envolvidas na molécula.

**Tabela 1:** Ligações de hidrogênio com  $H \cdots A < r(A) + 2.000$  (Å) e ângulo DHA maior que 110°.

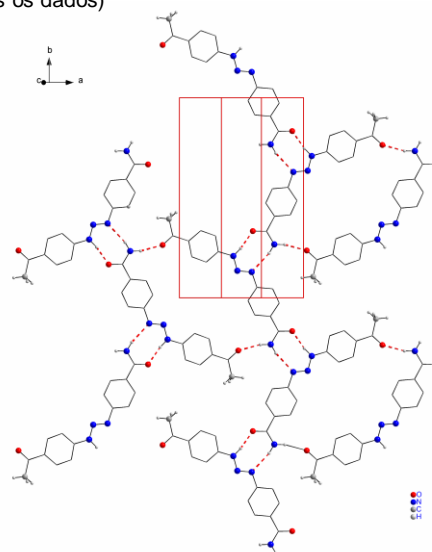
D–A	d(D–H)	d(H···A)	DHA	d(D···A)	A	Cód. de simetria
N13–H13	0.931	1.857	170.30	2.779	O2	[-x+3/2, y+1/2, -z+1/2]
N2–H2	0.955	2.026	165.45	2.960	O1	[-x, -y, -z+1]
N2–H3	0.907	2.255	167.50	3.147	N11	[-x+3/2, y-1/2, -z+1/2]

34<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

A Tabela 2 resume os dados cristalográficos de **1**.

**Tabela 2.** Dados cristalográficos do composto **1**.

Sistema cristalino	monoclínico
Grupo espacial	$P2_1/n$
a (Å)	7.2645(4)
b (Å)	17.2890(7)
c (Å)	11.6891(5)
V (Å <sup>3</sup> )	1460.50(12)
Z	4
$\beta$ (°)	95.833(2)
R1[I>2sigma(I)]	0.0445
wR2(todos os dados)	0.1327



**Figura 2.** Projeção da cela unitária do composto **1**, destacando as ligações de hidrogênio no plano de rede (103).

## Conclusões

Um ligante triazeno foi sintetizado e teve sua estrutura cristalina determinada por difração de raios-X em monocristal. O composto será avaliado quanto à atividade biológica.

## Agradecimentos

### CNPq – CAPES – UFSM

<sup>1</sup> Moore, D.S.; Roson, S.D; *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.*; 30, 1-68, 1986.

<sup>2</sup> Marchesi, F.; Turriziani, M.; Tortorelli, G.; Avvisati, G.; Torino, F.; De Vecchis, L.; *Pharmacol Res.*; 56, 275-287, 2007.

<sup>3</sup> Domingues, V.O. Hörner, R.; Reetz, L. G. B. et al. *J. Braz. Chem. Soc.* 21, 2226-2237, 2010.