

Estudo cristalino, molecular e supramolecular do composto 3-(hidroximetil)-3,4-diidroisoquinolin-1(2H)-ona

Camila L. Hino¹, Julio Zukerman-Schpector²

1. Estudante de IC de Química, UFSCar; *camila.lury@gmail.com
2. Pesquisador do Depto. de Química, UFSCar

Palavras Chave: *Cristalografia, estrutura molecular, supramolecular*

Introdução

A difração de raios X é o único método que permite a determinação sem ambiguidades das estruturas tridimensionais das substâncias e a posição relativa das moléculas que constituem a cela unitária. No contexto da área da Química Supramolecular contida na cristalografia, que é definida como a “química dos arranjos moleculares e das ligações intermoleculares” se estuda entidades de grande complexidade que resultam da associação de duas ou mais espécies químicas mantidas unidas por forças não covalentes.^{1,2} As forças intermoleculares induzem a automontagem formando uma rede organizada, sendo esse um processo espontâneo de organização molecular.¹ Essas interações são importantes na formação de cristais e na determinação da conformação de moléculas, podendo ser ligações secundárias, ligações de hidrogênio, interações doador-aceptor ou interações iônicas. As interações secundárias são aquelas entre dois átomos cujas distâncias são maiores que as correspondentes a uma ligação covalente, mas menores que a soma dos seus raios de van der Waals. As ligações de hidrogênio são formadas entre as espécies XH e Y, sendo que o X é um doador e Y um aceptor. Para a identificação das ligações de hidrogênio há dois parâmetros importantes, a distância entre os átomos doador e receptor que deve ser menor do que a soma dos seus respectivos raios de van der Waals e o ângulo ao redor do átomo de hidrogênio deve estar no intervalo 110°-180°.

Resultados e Discussão

A estrutura cristalina foi resolvida por métodos diretos³ e refinada por mínimos quadrados com a matriz completa de F^2 , utilizando o sistema SHELXS 97⁴ e os cálculos geométricos foram realizados utilizando o sistema WinGX⁵, obtendo a estrutura tridimensional mostrada na Figura 1.

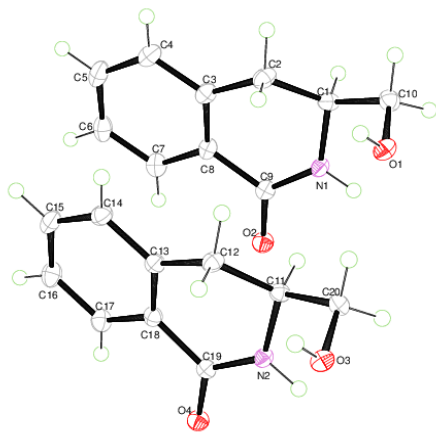


Figura 1. Estrutura tridimensional.

A estrutura supramolecular é formada por ligações de hidrogênio: N-H...O, O-H...O e C-H...O, e interações π do tipo C-H... π e π ... π .

Tabela 1. Ligações de hidrogênio.

D-H...A	D-H (Å)	H...A (Å)	D...A (Å)	D-H...A (°)
N1-HN1...O3 ¹	0,85	2,03	2,8738(15)	173
O1-H1A...O2 ²	0,82	1,86	2,6815(15)	178
N2-HN2...O1 ¹	0,91	2,00	2,9123(15)	177
O3-H3...O4 ²	0,82	1,89	2,7068(14)	177
C2-H2A...O2 ²	0,97	2,56	3,4002(17)	145
C12-H12A...O4 ²	0,97	2,50	3,3161(17)	142
C16-H16...O3 ³	0,93	2,55	3,2523(18)	133

Operação de simetria: (1) $x+1/2, -y+1/2, -z+1$; (2) $x-1, y, z$; (3) $-x+1, y-1, -z+3/2$

Na interação C-H... π a distância H...centróide é de 2,83 Å e o ângulo C-H... π de 169°, enquanto que a distância intercentróides é de 3,8782(9) Å com operações de simetria $-x+1, y-1/2, -z+3/2$ e x, y, z , respectivamente.

Conclusões

Com base nos resultados cristalográficos foi possível estabelecer que o cristal analisado apresenta duas moléculas independentes relacionadas por ligações de hidrogênio e interações π e que não tem mistura enantiomérica, sendo que nas duas moléculas o carbono assimétrico tem configuração S.

Agradecimentos

Ao CNPq pela bolsa de iniciação científica pelo programa PIBIC a CLH e a CAPES.

1- HADUC, I.; ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. “Supramolecular self-assembly through secondary bonds in organotellurium chemistry”. *J. Phosphorus, Sulfur and Silicon*, 171 : 171, 2001.

2- LEHN, J. M. “Perspectives in Supramolecular Chemistry – From Molecular Recognition towards Molecular Information Processing and Self-Organization” *Angew. Chem.*, 29 : 1304, 1990.

3- ALTOMARE, A.; CASCARANO, G.; GIOCOVAZZO, C.; GUAGLIARDI, A. “Completion and refinement of crystal structures with SIR92”, *J. Appl. Cryst.*, 26: 343, 1993.

4- SHELDRICK, G. M. SHELXL-97 Program for Crystal Structure Refinement, University of Göttingen, Germany, 1997.

5- FARRUGIA, L. J. “An Integrated System of Windows Programs for the Solution, Refinement and Analysis of Single Crystal X-Ray Diffraction Data”. *J. Appl. Cryst.* 32:837, 1999