

Análise teórico-experimental da conformação de 1,8-diidroxi-4,5-dinitroantraquinona

Leandro Ribeiro, Rodrigo S. Corrêa, Marcelo A. Barbosa, Javier Ellena
Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, Brasil.

Os derivados de antraquinona têm recebido interesse especial devido à suas aplicações industriais ^[1] e propriedades biológicas ^[2]. Com relação aos aspectos estruturais no estado sólido, os derivados de antraquinonas também têm sido bastante explorados. Um exemplo disso está no número de estruturas depositadas na base de dados de Cambridge (CSD), onde existem 335 estruturas. No entanto, ainda não foi realizado nenhum estudo aprofundado comparando os dados experimentais de difração de raios X (DRX) com cálculos teóricos. Com isso, o objetivo do presente trabalho é fazer uma análise comparativa entre os dados obtidos experimentalmente por meio de DRX e cálculos teóricos utilizando o método da Teoria do Funcional de Densidade (DFT). Neste estudo, focou-se principalmente na análise conformacional do composto conhecido como 1,8-diidroxi-4,5-dinitroantraquinona.

O composto em estudo foi cristalizado em metanol/clorofórmio e os dados cristalográficos foram obtidos a 150K. Estes foram comparados com a estrutura determinada previamente a temperatura ambiente ^[3] e observou-se que não existe nenhuma diferença significativa. Porém, quando a conformação deste composto foi comparada com os dados obtidos por meio de cálculos de otimização de geometria, observou-se que existem algumas diferenças entre ambas (Figura 1).

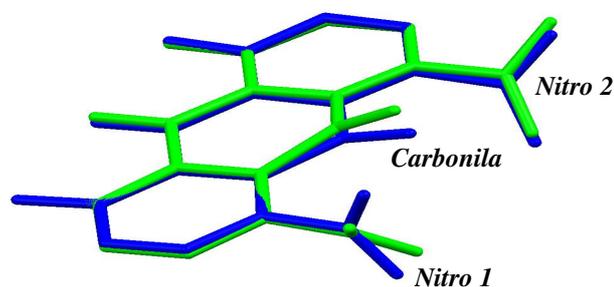


Figura 1: Sobreposição das moléculas calculada (verde) e determinada por DRX (azul).

Na Figura 1, a molécula calculada está representada em verde e a determinada a 150K está em azul. Nota-se que as principais diferenças entre ambas estão em duas regiões. Uma em torno da carbonila que está no meio dos dois grupos nitro (nitro 1 e nitro 2), e a outra, envolve o grupo nitro 1. Com relação à carbonila, a diferença entre os átomos de oxigênio é de 0,5Å, e a justificativa para tal diferença pode ser devido aos fatores estéricos causados pelos dois grupos nitro vizinhos. Já com relação às diferenças em nitro 1, para as duas moléculas, nota-se que os ângulos de torção são de -52,01° para a calculada, e -83,42° para a molécula determinada por DRX. A principal causa pela diferença é devido ao efeito de interações intermoleculares que ocorre em torno da molécula determinada por DRX. Um aspecto interessante ressaltado durante esta análise comparativa, foi que, no estado sólido, apenas o grupo nitro 1 sofre a influência das interações intermoleculares, já o grupo nitro 2 não participa de nenhuma interação que possa alterar a conformação molecular. Através do estudo teórico obteve-se o espectro de infravermelho simulado que foi comparado com espectro de infravermelho experimental, onde a comparação entre ambos forneceu informações importantes a respeito das propriedades no estado sólido do composto em estudo.

Referências:

- [1] Sequeira, C.A.C, Santos, D.M.F. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, **20**, 387-406 (2009).
- [2] Huang, Q., Lu, G., Sben, H.M., Cbung, M.C.M., Ong, C.N. *Medicinal Research Review*, **27**, 609-630 (2007).
- [3] Brown, C.J., Colclough, M.L. *Acta Crystallographica C*, **39**, 300-302 (1983).

Agradecimentos: CNPq e FAPESP