

Determinação da Estrutura Molecular e Supramolecular de Benzofenonas Mono e Dissubstituída.

Iara M. Landre Rosa^a, Talita E. Souza^a, Rodrigo S. Corrêa^b, Javier Ellena^b, Antonio C. Doriguetto^a.

^aDepartamento de Ciências Exatas, UNIFAL-MG, Alfenas-MG, Brasil.

^bInstituto de Física de São Carlos, USP, São Carlos-SP, Brasil.

Introdução: Hidroxibenzofenonas apresentam propriedades peculiares que estão relacionadas ao arranjo cristalino e as interações inter e intramoleculares, tais como elevada absorção na faixa do UV, excelente fotoestabilidade e baixa reatividade fotoquímica¹. Como os substituintes são responsáveis por diversas características e as ligações de hidrogênio existentes desempenham papel estrutural importante, faz-se necessária a determinação da estrutura molecular e supramolecular de tais compostos. Nesse trabalho reportamos a estrutura cristalina de (I) 3,4-dihidroxibenzofenona e (II) 3-hidroxibenzofenona.

Resultados e Discussão: Os cristais de (I) e (II) foram obtidos a partir da recristalização em solventes adequados pelo método de lenta evaporação do solvente. As análises de difração de raios X foram realizadas à temperatura ambiente, utilizando o difratômetro Enraf-Nonius Kappa-CCD e radiação MoK α . As estruturas foram resolvidas por meio de métodos diretos e refinadas por meio de mínimos quadrados de matriz completa de F². Os principais dados cristalográficos são mostrados na Tabela 1.

Tabela 1. Principais dados cristalográficos de (I) e (II).

Dados	(I)	(II)
Fórmula	C ₁₃ H ₁₀ O ₃	C ₁₃ H ₁₀ O ₂
Sistema Cristalino, Grupo Espacial	Monoclínico, C2/c	Monoclínico, P2 ₁ /n
Parâmetros de cela	a = 24,5154(8) Å b = 7,5640(3) Å c = 12,4729(3) Å β = 115,195(2)°	a = 4,0654(2) Å b = 20,227(1) Å c = 11,8012(4) Å β = 91,044(3)°
Z / Z'	8 / 1	4 / 1
R1 / wR2	0,0845 / 0,1418	0,0586 / 0,1305

Na estrutura (I) (Figura 1) os comprimentos de ligação C(1)–C(7) e C(7)=O(1) e a planaridade dos anéis são afetados principalmente pela via ressonante criada pela presença da hidroxila em posição para que permite a existência de um tautomerismo ceto-enólico em solução. O empacotamento apresenta três ligações de hidrogênio intermoleculares e uma intramolecular entre as hidroxilas presentes.

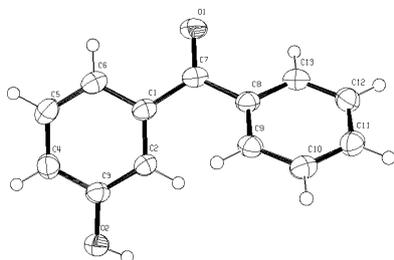


Figura 2. Representação Ortep de (II).
Suas geometrias intra e intermoleculares foram estudadas e comparadas em termos de efeitos estéricos, indutivos e supramoleculares.

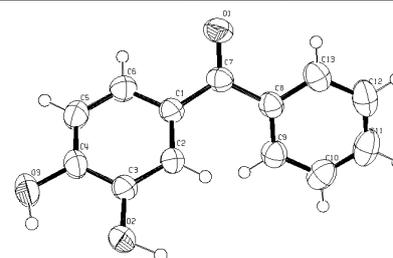


Figura 1. Representação Ortep de (I).

Já em (II) as ligações não são afetadas por ligações de hidrogênio ou pelos substituintes. O empacotamento apresenta uma ligação de hidrogênio intermolecular que une as moléculas em uma cadeia infinita ao longo da direção (001).

Conclusões: Neste trabalho foi determinada a estrutura de duas hidroxibenzofenonas: (I) e (II). Suas geometrias intra e intermoleculares foram estudadas e comparadas em termos de efeitos estéricos, indutivos e supramoleculares.

[1] B. W. Liebich, Acta Cryst. (1979), B35, 1186 – 1190.