

Cocrystal de acetanilida e óxido de trifenilfosfina

F. C. de Oliveira^a, G. C. dos Santos^a, N. G. Fernandes^a, J.C. Machado^a

^aDepartamento de Química, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil.

A estrutura da acetanilida, C₈H₉NO, foi determinada em 1954^[1], um novo refinamento foi executado em 1966^[2] e difração de nêutrons por monocristal foi reportada em 1995^[3]. A estrutura do óxido de trifenilfosfina, C₁₈H₁₅OP, foi determinada em 1992^[4,5]. A acetanilida possui propriedades analgésicas e antipiréticas e, atualmente, é empregado na síntese de outros fármacos. O óxido de trifenilfosfina é utilizado em cocrystalizações de compostos orgânicos na produção de materiais com propriedades elétricas e eletro-ópticas^[6], muitos desses compostos moleculares apresentam propriedades ópticas não lineares mais eficientes do que compostos predominantemente iônicos. Esse trabalho reporta a caracterização estrutural do composto resultante da cocrystalização da acetanilida e do óxido de trifenilfosfina. Os dados cristalográficos foram obtidos à 293K num difratômetro Gemini ultra do Laboratório de Cristalografia da UFMG, com radiação MoK α . A estrutura cristalina do composto foi resolvida através dos métodos diretos (SHELXS-97)^[7] e refinada utilizando o método dos mínimos quadrados (SHELXL-97)^[7]. O composto apresenta uma ligação de hidrogênio do tipo N-H...O, cuja distância N...O é de 2,90 Å. Há também uma interação fraca C(aromático)-H...O(acetanilida). As moléculas de acetanilida estão dispostas em planos aproximadamente perpendiculares entre si.

Tabela 1. Dados cristalográficos do composto.

Formula molecular	C ₂₆ H ₂₄ NO ₂ P
Massa Molar	413,45 g/mol
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo Espacial	P2 ₁ /n
a	9,0122(1) Å
b	16,9886(3) Å
c	14,5418(2) Å
β	95,727(1)°
Z	4
R	0,0428
S	1,049
wR	0,1330

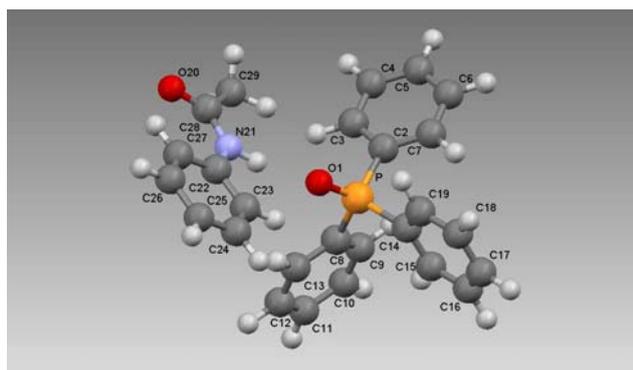


Figura 1. Representação do Mercury 2.2^[9] para o composto.

Referências

- [1] Brown, C. J., Corbridge, D. C. E., Acta Cryst., **7**, 711-715 (1954).
- [2] Brown, C. J., Acta Cryst., **21**, 442-445 (1966).
- [3] Johnson, S. W., Eckert, J., Barthes, M., McMullan, R. K., Muller, M., J.Phys. Chem., **99**, 16253-16260 (1995).
- [4] Al-Farhan, K. A., J. of Cryst.and Spectr. Research, **22**, 687 (1992).
- [5] Thomas, J. A., Hamor, T. A., Acta Cryst., **C49**,355 -357 (1993).
- [6] Etter, M. C., Baures, P. W., J. Am. Chem. Soc., **110**, 639-640 (1988).
- [7] Sheldrick, G.M., SHELXL-97 and SHELXS-97: Program for Crystal Structure Analysis. Univ. of Göttingen, Göttingen, Germany(1997).
- [8] Farrugia, L.J., J. Appl.Cryst., **30**, 565 (1997).
- [9] C. F. Macrae, I. J. Bruno, J. A. Chisholm, P. R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, L. Rodriguez-Monge, R. Taylor, J. van de Streek and P. A. Wood, Mercury CSD 2.0 - new features for the visualization and investigation of crystal structures, J. Appl. Cryst., **41**, 466-470 (2008).

Agradecimentos

FAPEMIG, FINEP e UFMG.