

Determinação da Estrutura Molecular e Supramolecular de Benzofenonas Poli-hidroxiladas.

Iara M. Landre Rosa^a, Douglas M. Silva^a, Rodrigo S. Corrêa^b, Javier Ellena^b, Antônio C. Doriguetto^a.

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

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

Introdução: Hidroxibenzofenonas são substâncias que combinam elevada absorção na faixa do UV e uma excelente fotoestabilidade^[1]. Muitas de suas propriedades estão relacionadas ao arranjo cristalino e às interações inter e intramoleculares. Como os substituintes são responsáveis por diversas características e as ligações de hidrogênio existentes desempenham papel estrutural importante, é de fundamental importância que se determine a estrutura molecular e supramolecular de tais moléculas. Nesse trabalho reportamos a estrutura cristalina de (I) 2,2',4,4'-tetraidroxibenzofenona e (II) 2,3,4-triidroxibenzofenona.

Resultados e Discussão: Os cristais foram obtidos a partir da recristalização pelo método de evaporação lenta do solvente, utilizando solventes apropriados. As análises de difração de raios X foram realizadas à temperatura ambiente, utilizando o difratômetro Enraf-Nonius Kappa-CCD e radiação MoK α ($\lambda = 0,71073$ Å). Os principais dados cristalográficos são mostrados na Tabela 1.

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

Dados	(I)	(II)
Fórmula	C ₁₃ H ₁₀ O ₅ .H ₂ O	C ₁₃ H ₁₀ O ₄
Sistema Cristalino / Grupo espacial	Monoclínico C2/c	Monoclínico P2 ₁ /n
Parâmetros de cela	15,139(5) Å	5.2070(10) Å
	7,763(5) Å	21.6520(10) Å
	11,069(5) Å	18.8170(10) Å
	100,628(5)°	90.403(10)°
Z/Z'	4/0,5	8/2
GooF on F ²	1,042	1.052
R1 / wR2	0,0496 / 0,1186	0,0583 / 0,1222

Em (I) (Figura 1) verifica-se um desvio nos comprimentos das ligações C(1)–C(7) e C(7)=O(1) devido a presença da hidroxila em posição para, conjugando o anel à carbonila, bem como pela presença das ligações de hidrogênio intramoleculares. O empacotamento é estabilizado por três ligações de hidrogênio intermoleculares envolvendo a água de cristalização e uma intramolecular, além de uma interação π -aril ... π -aril. Deve-se enfatizar que já está reportada na literatura a estrutura do polimorfo anidro.

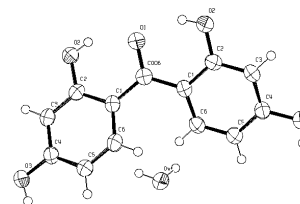


Figura 1. Representação Ortep de (I).

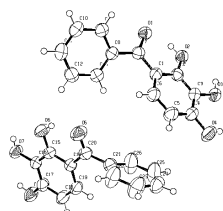


Figura 2. Representação Ortep de (II)

Em (II) (Figura 2) também verifica-se desvios em alguns comprimentos de ligação em ambas as unidades assimétricas, que podem ser explicadas por efeitos de ligação de hidrogênio intermolecular e posicionamento das hidroxilas. A diferença entre as duas unidades assimétricas se dá na distinção do ângulo de torção entre os anéis quando comparadas as duas. O empacotamento é estabilizado por ligações de hidrogênio intermoleculares e intramoleculares. Vale ressaltar que já está reportada na literatura o polimorfo hidratado desta molécula, sendo este um estudo inédito.

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

Agradecimentos: CNPq, PIBIC/CNPq, Unifal-MG, FAPEMIG e CAPES pelo apoio financeiro.