

## A estrutura molecular e o empacotamento cristalino de uma nova chalcona metoxilada

W. F. Vaz<sup>a</sup>, P. S. C. Jr<sup>a</sup>, J. M. F. Custódio<sup>a</sup>, G. L. B. de Aquino<sup>a</sup>, H. B. Napolitano<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Estadual de Goiás, Anápolis, GO, Brazil.

As chalconas metoxiladas, ou metóxi-chalconas, são conhecidas como compostos promissores por apresentarem várias propriedades biológicas<sup>[1]</sup>. Quimicamente, uma chalcona consiste de dois anéis aromáticos unidos por um sistema  $\alpha,\beta$  insaturado altamente eletrofílico ( $-\text{CO}-\text{CH}=\text{CH}-$ ). Normalmente, esse esqueleto assume uma conformação linear ou quase planar. No entanto, a presença de grupos substituintes apropriados nos anéis aromáticos pode modificar a distribuição eletrônica na molécula, o que leva a propriedades diversas<sup>[2]</sup>.

Uma ampla análise da nova metóxi-chalcona (*E*)-3-(4-etilfenil)-1-(4-metóxi)prop-2-en-1-ona,  $\text{C}_{18}\text{H}_{18}\text{O}_2$ , é apresentada via difração de raios-X. Esse composto centrossimétrico cristaliza no grupo espacial  $\text{P2}_1/\text{c}$ , com quatro moléculas por cela unitária, apresentando a seguinte métrica:  $a = 19.5245(6)\text{Å}$ ,  $b = 5.8442(10)\text{Å}$ ,  $c = 13.0903(4)\text{Å}$  and  $\alpha = \beta = 90^\circ$  e  $\gamma = 92.2050^\circ(10)$ . Sua estrutura molecular apresenta três partes consideradas planares, os dois anéis aromáticos e a porção enona, mas a análise conformacional mostra que o anel A apresenta uma torção de  $15.14^\circ$  em relação ao anel B, resultando em uma molécula não planar. Além disso, o grupo metóxi é coplanar ao anel A [ $179.47(2)^\circ$ ], na Figura 1 tem-se a representação Ortep, com probabilidade de 50%, para a  $\text{C}_{18}\text{H}_{18}\text{O}_2$ . Os grupos insaturados e o grupo cetona apresentam uma orientação sinperiplanar com um ângulo de torção de  $15.14(8)^\circ$  para os átomos O1-C9-C8-C7. O ângulo diedro entre os anéis benzênicos é  $12.18(7)^\circ$ , correspondendo a uma conformação cisóide.

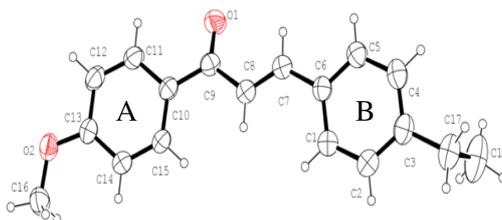


Figura 1: Representação Ortep, com 50% de probabilidade, mostrando a numeração para a  $\text{C}_{18}\text{H}_{18}\text{O}_2$ .

O grau de planaridade dessa metóxi-chalcona pode ser entendido pelo equilíbrio entre a estabilização das forças intermoleculares - conjugação em toda a molécula e a repulsão estérica entre os substituintes ligados aos anéis aromáticos. As moléculas de  $\text{C}_{18}\text{H}_{18}\text{O}_2$  se empacotam devido aos fracos contatos intermoleculares  $\text{CH}\cdots\pi$  e  $\text{CH}\cdots\text{O}$ , orientados principalmente pelo grupo metóxi, ver Figura 2.

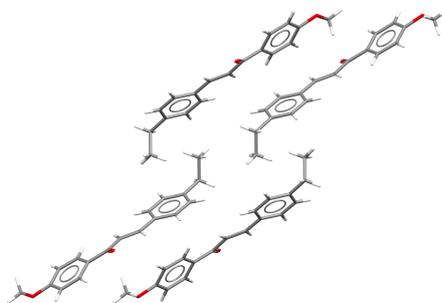


Figura 2: Representação do empacotamento cristalino, ao longo do eixo  $[010]$ , da  $\text{C}_{18}\text{H}_{18}\text{O}_2$ .

A interação C16-H16C...O2 forma uma associação dimérica entre moléculas adjacentes em  $-x,-y,-z+2$  enquanto que C18-H16B...O1 [ $x,-y-1/2,+z+1/2$ ], C8-H8...O1 [ $x,+y+1,+z$ ] e C15-H15...Cg (Tabela 1) são responsáveis por criar uma rede tridimensional de empacotamento desses dímeros.

Tabela 1: Ligações de Hidrogênio e “short contacts” para  $C_{18}H_{18}O_2$ .

D-H...O	D...A	H...A	D-H...A
C8-H8...O1 <sup>(i)</sup>	3.797	2.994	145.56
C18-H16B...O1 <sup>(ii)</sup>	3.314	2.589	132.35
C18-H16C...O2 <sup>(iii)</sup>	3.429	2.646	139.02
C15-H15...Cg	3.663	3.001	129.47

Códigos de Simetria: (i)  $x,+y+1,+z$  (ii)  $x,-y-1/2,+z+1/2$  (iii)  $-x,-y,-z+2$

Na estrutura molecular dessa metóxi-chalcona, o contato entre os grupos metóxi e carbonil é fundamental para a orientação do ângulo C7-C8-C9-C10. Além disso, a adição de grupos como substituinte implica em interações mais fracas, como contato  $\pi$ - $\pi$ .

[1] Bandgar, B.P. *et al.*, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, **18(3)**, p. 1364-1370 (2010).

[2] Prasad, Y.R., Rao, A.L., Rambabu, R., *E-Journal of Chemistry*, **5(3)** p. 461-466. (2008).

*Acknowledgments*: FAPEG; UEG.