

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

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

^a*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^[1]. Quimicamente, uma chalcona consiste de dois anéis aromáticos unidos por um sistema α,β 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^[2].

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: $a = 19.5245(6)\text{\AA}$, $b = 5.8442(10)\text{\AA}$, $c = 13.0903(4)\text{\AA}$ 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° 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.

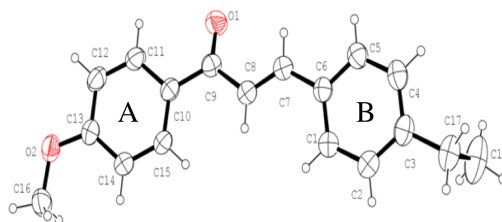


Figura 1: Representação Ortep, com 50% de probabilidade, mostrando a numeração para a $\text{C}_{18}\text{H}_{18}\text{O}_2$.

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.

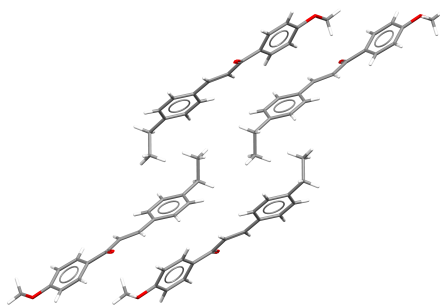


Figura 2: Representação do empacotamento cristalino, ao longo do eixo $[010]$, da $\text{C}_{18}\text{H}_{18}\text{O}_2$.

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 C₁₈H₁₈O₂.

D—H...O	D...A	H...A	D—H...A
C8—H8...O1 ⁽ⁱ⁾	3.797	2.994	145.56
C18—H16B...O1 ⁽ⁱⁱ⁾	3.314	2.589	132.35
C18-H16C...O2 ⁽ⁱⁱⁱ⁾	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 π - π .

[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.