

### 3.3) 6-aziridi-1-il-4a,7,8a-Tricloro-1,4,4a,8a-tetrahidro-1,4-metano-naftaleno-5,8-diona (AC4)

A partir dos resultados da análise de difração de raio X, verificou-se que a estrutura do AC4 pertence ao sistema cristalino ortorrômbico, grupo espacial  $P2_1ma$ .

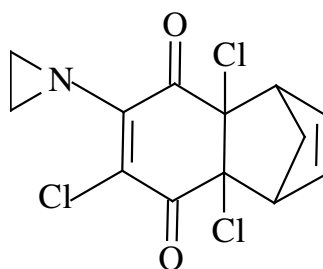


Tabela 3.3.1 - Dados cristalográficos e de refinamento para a AC4.

Dados Cristalográficos e de refinamento	
Fórmula empírica	$C_{13}H_{10}O_2NCl_3$
Massa Molar	$318,57 \text{ g.mol}^{-1}$
Temperatura	293(2)K
$\lambda$ (MoK $\alpha$ )	0,71073 Å
Sistema Cristalino	Ortorrômbico
Grupo espacial	$P2_1ma$
a	7,9628(3) Å
b	13,3491(5) Å
c	12,5216(5) Å
$\beta$	90,13(4)
Volume	$1331,0(9) \text{ Å}^3$
Z	4
Densidade calculada	$1,590 \text{ g.cm}^{-3}$
Coefficiente de absorção ( $\mu$ )	$0,684 \text{ mm}^{-1}$
F(000)	648
Tamanho do cristal	0,25 x 0,22 x 0,20 mm
$\theta_{\text{máx.}}$	$25,5^\circ$
Reflexões coletadas	5510
Reflexões independentes	3007
Reflexões observadas	2848
R(int.)	0.0200
Método de refinamento	Refinamento por mínimos quadrados com matriz completa de $F^2$
Dados/restrições/parâmetros	3007/0/172
Índice R final [ $I > 2\sigma(I)$ ] R, wR2	0,0392; 0,1085
Índice R (Todos os dados) R, wR2	0,0419; 0,1110;

### 3.3.1 - Resultados cristalográficos

Tabela 3.3.2. - Coordenadas atômicas ( $\times 10^4$ ) e fator de deslocamento atômico isotrópico equivalente ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ).

	x	y	z	U(eq)
Cl(1)	9495 (1)	351 (1)	8711 (1)	61 (1)
Cl(2)	9874 (1)	847 (1)	6359 (1)	56 (1)
Cl(3)	6694 (1)	-2176 (1)	5290 (1)	69 (1)
O(1)	6537 (4)	-1053 (2)	9084 (2)	75 (1)
O(2)	7123 (4)	-57 (2)	5009 (2)	64 (1)
N(1)	6519 (3)	-2564 (2)	7649 (2)	51 (1)
C(1)	6271 (4)	1010 (2)	8368 (2)	43 (1)
C(2)	7585 (3)	226 (2)	7962 (2)	38 (1)
C(3)	7006 (4)	-845 (2)	8202 (2)	48 (1)
C(4)	6965 (3)	-1606 (2)	7327 (2)	41 (1)
C(5)	7056 (3)	-1318 (2)	6303 (2)	44 (1)
C(6)	7286 (4)	-292 (2)	5930 (2)	43 (1)
C(7)	7777 (3)	508 (2)	6749 (2)	39 (1)
C(8)	6592 (4)	1445 (2)	6651 (2)	46 (1)
C(9)	4839 (4)	1019 (2)	6776 (3)	52 (1)
C(10)	4653 (4)	768 (2)	7782 (3)	50 (1)
C(11)	6853 (4)	1932 (2)	7746 (3)	50 (1)
C(12)	7421 (5)	-3115 (3)	8462 (3)	67 (1)
C(13)	7437 (5)	-3459 (2)	7338 (3)	66 (1)

Tabela 3.3.3 - Coordenadas calculadas dos átomos de Hidrogênio ( $\times 10^4$ ).

	x	y	z	U(eq)
H(1)	6185	1088	9144	52
H(8)	6774	1878	6029	56
H(9)	4041	947	6238	62
H(10)	3694	490	8084	60
H(11A)	8017	2104	7885	60
H(11B)	6138	2511	7858	60
H(12A)	6769	-3499	8972	80
H(12B)	8441	-2820	8747	80
H(13A)	8465	-3374	6935	79
H(13B)	6793	-4053	7159	79

Tabela 3.3.4 - Distâncias (Å) e ângulos (°) de ligação.

---

C1(1)-C(2)	1,793(3)
C1(2)-C(7)	1,799(3)
C1(3)-C(5)	1,732(3)
O(1)-C(3)	1,199(4)
O(2)-C(6)	1,203(4)
N(1)-C(4)	1,387(3)
N(1)-C(12)	1,446(4)
N(1)-C(13)	1,455(4)
C(1)-C(10)	1,516(4)
C(1)-C(11)	1,529(4)
C(1)-C(2)	1,566(4)
C(2)-C(3)	1,532(4)
C(2)-C(7)	1,572(3)
C(3)-C(4)	1,495(4)
C(4)-C(5)	1,340(4)
C(5)-C(6)	1,459(4)
C(6)-C(7)	1,531(4)
C(7)-C(8)	1,571(4)
C(8)-C(9)	1,516(4)
C(8)-C(11)	1,531(4)
C(9)-C(10)	1,312(5)
C(12)-C(13)	1,481(6)
C(4)-N(1)-C(12)	123,2(3)
C(4)-N(1)-C(13)	123,4(3)
C(12)-N(1)-C(13)	61,4(2)
C(10)-C(1)-C(11)	100,6(2)
C(10)-C(1)-C(2)	105,6(2)
C(11)-C(1)-C(2)	99,8(2)
C(3)-C(2)-C(1)	111,0(2)
C(3)-C(2)-C(7)	116,3(2)
C(1)-C(2)-C(7)	102,7(2)
C(3)-C(2)-C1(1)	103,9(2)
C(1)-C(2)-C1(1)	109,6(2)
C(7)-C(2)-C1(1)	113,5(2)
O(1)-C(3)-C(4)	120,8(3)
O(1)-C(3)-C(2)	119,4(3)
C(4)-C(3)-C(2)	119,8(2)
C(5)-C(4)-N(1)	123,9(3)
C(5)-C(4)-C(3)	120,3(2)
N(1)-C(4)-C(3)	114,7(2)
C(4)-C(5)-C(6)	125,6(2)
C(4)-C(5)-C1(3)	120,1(2)
C(6)-C(5)-C1(3)	114,0(2)
O(2)-C(6)-C(5)	122,6(3)
O(2)-C(6)-C(7)	119,2(2)
C(5)-C(6)-C(7)	118,2(2)
C(6)-C(7)-C(8)	110,5(2)
C(6)-C(7)-C(2)	117,0(2)
C(8)-C(7)-C(2)	102,0(2)
C(6)-C(7)-C1(2)	103,2(2)
C(8)-C(7)-C1(2)	109,6(2)
C(2)-C(7)-C1(2)	114,5(2)
C(9)-C(8)-C(11)	101,0(2)
C(9)-C(8)-C(7),	104,2(2)
C(11)-C(8)-C(7)	100,8(2)
C(10)-C(9)-C(8)	107,5(3)
C(9)-C(10)-C(1)	108,2(3)
C(1)-C(11)-C(8)	94,2(2)
N(1)-C(12)-C(13)	59,6(2)
N(1)-C(13)-C(12)	59,0(2)

---

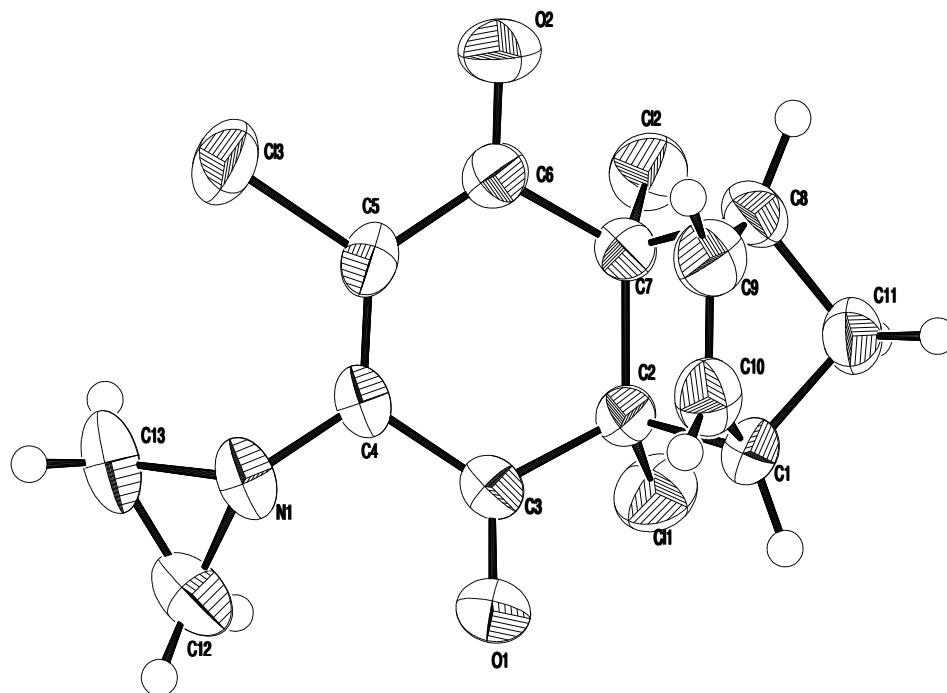


Figura 3.2 - Estrutura molecular do composto 6-aziridin-1-il-4a,7,8a-Tricloro-1,4,4a,8a-tetrahidro-1,4-metano-naftaleno-5,8-diona (AC4), mostrando os elipsóides de 50% de probabilidade.

### 3.3.2 - Análise dos resultados

As distâncias de ligação entre os átomos C5 – C4; C7 - C2 e C9 - C10 são, respectivamente, 1,340(4), 1,572(3) e 1,312(5) Å. Já as distâncias entre os átomos de carbono e oxigênio, C3 – O1 e C6 – O2, são 1,199(4) e 1,203(4) Å, respectivamente. O ângulo formado entre os átomos O1 – C3 – C4 – N1 é de -6,24° e aquele formado entre O2 – C6 – C5 – Cl3 é de 4,78°; e finalmente os ângulos entre Cl2 – C7 – C6 – O2 e Cl1 – C2 – C3 – O1 são -66,4(4)° e 68,3(4)°, respectivamente.