

REUNIAO ANUAL DA SBPC, 4J., Fortaleza-CE, 5^o
 Resumo. li. Cult. Suplemento, 4J(7):420, jul. 1989

0220172243

793

0010024546

794

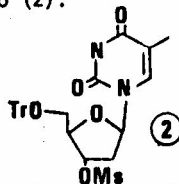
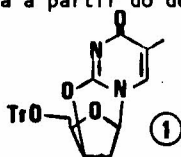
795

67-D.2.3

A ESTRUTURA CRISTALINA DA 5'-O-TRITIL-2,3'-ANIDROTIMIDINA

Maria de Lourdes M. Fernandes, Alafide B. de Oliveira, Maria Amélia D. Boaventura, Márcia Maria P. Freitas (Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais), Regina Helena de A. Santos e Yvonne P. Mascarenhas (Instituto de Física e Química de São Carlos da Universidade de São Paulo).

A 5'-O-tritil-2,3'-anidrotimidina (1) é um intermediário na síntese da 3'-anidro-3'-desoxitimidina (AZT) e foi obtida a partir do derivado mesclado (2).



Sua estrutura cristalina foi determinada com o objetivo de esclarecer significativas mudanças observadas no espectro RMN¹H (nos deslocamentos químicos e constantes de acoplamento), ao passar de 2 para 1. Esta substância (C₂₉H₂₆O₄N₂) cristaliza no sistema monoclinico, grupo espacial P2₁. Os parâmetros da cela unitária são: a = 8,765 Å, b = 13,547 Å, c = 10,704 Å, α = γ = 90°, β = 111,78° e v = 1180,3 Å³, com uma densidade calculada = 1,313 e z = 2 moléculas por cela unitária. As intensidades de 1719 reflexões únicas foram coletadas usando-se o difratômetro automático CAD-4 com radiações monocromáticas K_α do molibdênio. A estrutura foi resolvida por métodos estatísticos (SHELXS-86) com sucessivas aplicações de Fourier - diferenças. O refinamento foi feito por métodos de mínimos quadrados (SHELX-76), atingindo-se um índice de discordância de R = 0,0377 para as reflexões observadas. (FINEP, CNPq).

p. 420

00001384

Campo	Dado
*****	Documento 1 de 1
No. Registro	000791757
Tipo de material	TRABALHO DE EVENTO-RESUMO PERIODICO - NACIONAL
Entrada Principal	Fernandes, M L M (*)
Título	Estrutura cristalina da 5'-O-TRITIL-2,3' - anidrotimidina.
Imprensa	São Paulo, 1989.
Descrição	p.420.
Autor Secundário	Oliveira, A B (*)
Autor Secundário	Boaventura, M A D (*)
Autor Secundário	Freitas, M M P (*)
Autor Secundário	Santos, R H A
Autor Secundário	Mascarenhas, Yvonne Primerano
Autor Secundário	Reunião Anual da SBPC (41. 1989 Fortaleza)
Fonte	Ciência e Cultura, São Paulo, v.41, n.7 supl., p.420, jul. 1989
Unidade USP	IFQSC-Q -- INST DE QUÍMICA DE SÃO CARLOS
Unidade USP	IFQSC-Q -- INST DE QUÍMICA DE SÃO CARLOS
Localização	IFSC PROD001384
Localização	IQSC P1234