

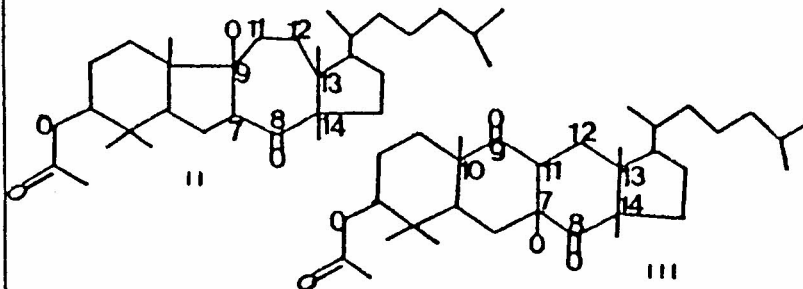
ENCONTRO DE QUÍMICA DO NORDESTE, 4., Análogo,
22 a 24 de novembro de 1989. Resumos

CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION OF (II) AND (III) : 3 β -acetoxy-9 α -hydroxy-8,9-seco-7,9-cyclo-7 α -lanostane-8-one and 3 β -acetoxy-7 α -hydroxy-8,9-seco-7,11-cyclo-11 β -lanostane-8,9-dione. L. ZUKERMAN, S. Q. F. ECIOB (Laboratório de Cristalografia e Físico-Química dos Materiais, DQ-UFAL), E. E. CASTELLANI (Instituto de Física e Química de São Carlos-USP), V. L. REHDER and A. J. MARSAIOLI (Instituto de Química-UNICAMP)

For an introduction to this work see part (I) in the present communication. The crystal structures of the title compounds are presented.

(II) Crystal data : C₃₂H₅₂O₄, orthorhombic, P2₁2₁2₁, a=7.040(2), b=18.179(3), c=23.497(5) Å, V=3007(2) Å³, Z=4, D_x=1.111 g cm⁻³, λ(MoKα)=0.71073 Å, μ=0.04 mm⁻¹, F(000)=1112, R=0.086 for 1057 independent reflections with I>3σ(I). The seven-membered ring is in a chair conformation.

(III) Crystal data : C₃₂H₅₂O₅, monoclinic, P2₁, a=14.682(3), b=6.145(2), c=16.637(5) Å, β=98.12(2)°, V=1486(1) Å³, Z=2, D_x=1.160 g cm⁻³, λ(MoKα)=0.71073 Å, μ=0.04 mm⁻¹, F(000)=568, R=0.070 for 634 independent reflections with I>3σ(I). The three six-membered rings are in chair conformations and the five-membered ring is in an envelope conformation.



Work partially supported by FINEP, CNPq and FAPESP

P. 20

Campo	Dado
*****	Documento 1 de 1
No. Registro	000799940
Tipo de material	TRABALHO DE EVENTO-RESUMO - NACIONAL
Entrada Principal	Zukerman-Schpector, Júlio (*)
Título	Crystal structure determination of (ii) and (iii) : 3'BETA'-acetoxy-9'ALFA'-hydroxy-8,9-seco-7, 9-cyclo-7'ALFA'-lanostane-8-one and 3'BETA'-acetoxy-7'ALFA'-hidroxy-8,9-seco-7, 11-cyclo-11'BETA'-lanostane-8,9-dione.
Imprenta	São Paulo : Sociedade Brasileira de Quimica, 1989.
Descrição	p.20.
Autor Secundário	Castellano, Eduardo Ernesto
Autor Secundário	Rehder, V L G (*)
Autor Secundário	Marsaioli, A J (*)
Autor Secundário	Encontro de Quimica do Nordeste (4. 1989 Aracaju)
Fonte	Resumos, São Paulo : Sociedade Brasileira de Quimica, 1989
Unidade USP	IFQSC-F -- INST DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
Localização	IFSC PROD001288