

## Estudo Molecular por Difração de Raios-X de 3-aryl(heteroaril)-5-hidróxi-5-triclorometil-4,5-diidroisoxazóis

Patrick T. Campos\* (PG), Juliana S. Bitencurt (IC), Juliana L. Malavolta (IC), Alynne A. Souto (IC), Pablo Machado (PG), Luciana A. Piovesan (PQ), Alex F. C. Flores (PQ), Marcos A. P. Martins (PQ).  
[patrickseco@yahoo.com.br](mailto:patrickseco@yahoo.com.br).

Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, 97100-900 Santa Maria, RS, Brasil.

Palavras Chave: Raios-X, 4,5-diidroisoxazóis, ligação de hidrogênio.

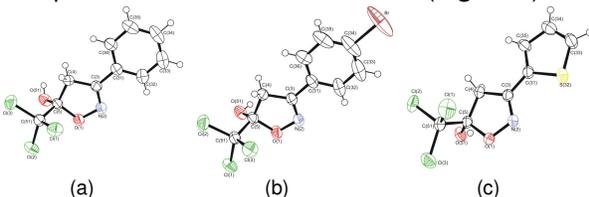
### Introdução

Compostos heterocíclicos despertam grande interesse devido a sua aplicabilidade em diversos campos da química moderna. Dentre os compostos heterocíclicos, merecem destaque os de cinco membros, especialmente os isoxazóis, os quais atraem o interesse de pesquisadores devido a sua importância medicinal e biológica.<sup>1</sup>

Tendo em vista a importância desta classe de compostos neste trabalho nós reportamos os resultados da determinação estrutural por difração de Raios-X de três 5-hidróxi-5-triclorometil-4,5-diidroisoxazóis.

### Resultados e Discussão

Os 5-hidróxi-5-triclorometil-4,5-diidroisoxazóis cristalizaram no sistema cristalino monoclinico e grupo espacial  $C2/c$ , com apenas uma molécula independente na unidade assimétrica (**Figura 1**).



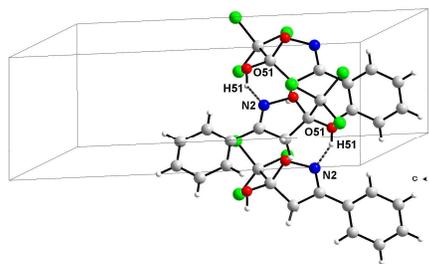
**Figura 1.** (a) Estrutura do composto 1; (b) Estrutura do composto 2; (c) Estrutura do composto 3.

As distâncias interatômicas observadas para  $N(2)=C(3)$  revelaram valores de 1,289(3) Å, 1,277(5), e 1,283(2) Å nos compostos 1-3, respectivamente, indicando uma pequena deslocalização eletrônica entre a ligação dupla  $N(2)=C(3)$  com os substituintes aril(heteroarila) da posição-3 destes compostos, sendo esses valores relativamente maiores que 4,5-diidroisoxazóis que apresentam um hidrogênio ou grupos alquila nesta posição.<sup>2</sup>

Em todas as moléculas estudadas o anel 2-isoxazolina tem mostrado ser essencialmente plano com o desvio do r.m.s. de 0,0011, 0,0009 e 0,0045 Å para os 4,5-diidroisoxazóis 1-3, respectivamente. O ângulo interplanar dos mínimos quadrados da fenila, 4-bromofenila e tien-2-ila com o anel 4,5-diidroisoxazol apresenta valores de 1,11(1), 2,38(2) e 3,03(1)°, em 1-3, respectivamente.

32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

As estruturas cristalinas dos compostos 1-3 foram estabilizadas por ligações de hidrogênio intermoleculares da hidroxila com o átomo N(2) formando cadeias infinitas ao longo do plano  $bc$  (**Figura 2**). No 4,5-diidroisoxazol 1 a distância para  $O(51)\cdots N(2)$  foi de 2,822 Å ( $-x+1/2, y-1/2, -z+1/2$ ). No composto 2 a distância para  $O(51)\cdots N(2)$  foi de 2,820 Å ( $-x+1/2, y-1/2, -z+3/2$ ). O composto 2 apresentou também uma ligação de hidrogênio intermolecular adicional do tipo  $O(51)-H(51)\cdots O(1)$  com a distância para  $O(51)\cdots O(1)$  de 3,337 Å ( $-x+1/2, y-1/2, -z+3/2$ ). Outra dado obtido a partir da análise de raios-X do composto 3 foi a distância de 2,860 Å para  $O(51)\cdots N(2)$  ( $-x+1/2, y+1/2, -z+1/2$ ) e as cadeias formadas estariam ligadas através de interações do tipo  $S\cdots S$  entre dois grupos tien-2-ilas com distância de 3,436 Å ( $0,5-x, 1,5-y, 1-z$ ). Esta distância interatômica tem mostrado ser menor que a soma dos raios de van der Waals para o átomo de enxofre, assim como, as distâncias entre os átomos doadores e aceptores de próton nas ligações de hidrogênio.<sup>3</sup>



**Figura 2.** Projeção das ligações de hidrogênio do composto 1 formando cadeias infinitas ao longo do plano  $bc$ .

### Conclusões

A existência da ressonância eletrônica pode explicar os anéis estarem no mesmo plano. As ligações de hidrogênio geraram um padrão no empacotamento das estruturas cristalinas 1-3.

### Agradecimentos

CNPq, CAPES e FAPERGS pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> Miyachi, H. *Curr. Med. Chem.* **2007**, *17*, 2335.

<sup>2</sup> Levisales, M. P.; Bellec, C. J. *Heterocyclic Chem.* **1980**, *17*, 1537.

<sup>3</sup> Pyykko, P.; *Chem. Rev.* **1997**, *97*, 597.