

Síntese e Estudo Estrutural de 5-Aril-1-pentafluorfenil-1H-pirazóis: Halogênios em Interações *Sigma-Hole*

Patrick T. Campos (PG)¹, Kelvis Longhi (PG)¹, Dayse N. Moreira (PQ)¹, Clarissa P. Frizzo (PQ)¹, Nilo Zanatta (PQ)¹, Helio G. Bonacorso (PQ)¹, Marcos A. P. Martins (PQ)¹. [*patrickseco@yahoo.com.br](mailto:patrickseco@yahoo.com.br)

¹Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, 97105-900 Santa Maria RS Brasil.

Palavras Chave: Raios-X, Pirazóis, *Sigma-Hole*.

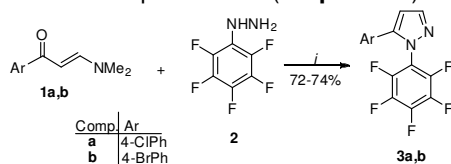
Introdução

A química de pirazóis e seus análogos vêm sendo de interesse constante devido a sua aplicação na indústria farmacêutica. Recentemente, nós publicamos um estudo estrutural de 4,5-diidro-1H-pirazóis, onde foram descritos dados moleculares e supramoleculares.¹

Devido à importância dos pirazóis e como uma continuação da nossa investigação sobre as características estruturais desta classe de compostos, neste trabalho nós relatamos os resultados da determinação estrutural por difração de Raios-X de dois 1-pentafluorfenil-1H-pirazóis.

Resultados e Discussão

Os pirazóis **3a,b** foram obtidos a partir da reação de ciclocondensação entre as β -enaminonas **1a,b** e a hidrazina **2** em líquido iônico (**Esquema 1**).



Esquema 1. i: [BMIM][BF₄], HCl (10 mol%), 90 °C, 1,5 h

Os anéis pirazóis foram obtidos como estruturas essencialmente planas com o desvio do r.m.s. de 0,0033 e 0,0038 Å, para os compostos **3a** e **3b**, respectivamente. Os ângulos entre os planos do pirazol e da fenila [C(11)-C(16)] encontrados para os compostos **3a** e **3b** foram de 60,56(8) e 61,13(11)°, respectivamente. Já o ângulo entre os planos do pirazol e da fenila [C(51)-C(56)] encontrados para os compostos **3a** e **3b** foram de 47,07(10) e 48,02(13)°, respectivamente. Todos estes valores podem indicar uma ausência de ressonância eletrônica entre os anéis aromáticos por não estarem no mesmo plano.

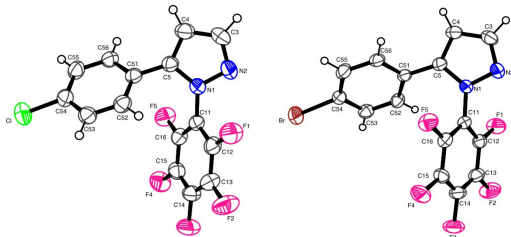


Figura 1. Estrutura dos compostos **3a** e **3b**.

34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

O composto **3a** apresentou duas interações do tipo C-H...F como C(3)-H(3)...F(4) (-x,y-1/2,-z+1/2) e C(56)-H(56)...F(2) (x,y,z-1) com distâncias interatômicas de 3,540(4) e 3,301(3) Å para C(3)...F(4) e C(56)...F(2), respectivamente. Adicionalmente, este composto apresenta a interação Cl...F(1) (-x+1,y+1/2,-z+1/2) com distância interatômica de 3,056(2) Å e ângulo de 159,40(11)° para C(54)-Cl...F(1), formando cadeias infinitas ao longo do plano *bc* (**Figura 2**). O composto **3b** apresentou a mesma interação C(56)-H(56)...F(2) (x,y,z+1) com distância interatômica de 3,296(4) Å formando cadeias infinitas ao longo do plano *bc* (**Figura 2**) e estas cadeias estão conectadas pela interação Br...F(1) (-x+1,y-1/2,-z+1/2) com distância interatômica de 3,124(2) Å e ângulo de 155,77(12)° para C(54)-Br...F(1). Estas interações entre halogênios com geometria definida são conhecidas como σ -Hole.²

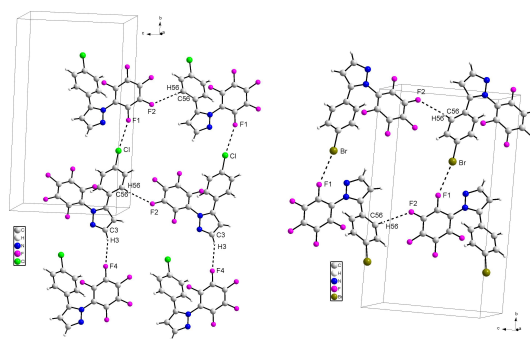


Figura 2. Empacotamento cristalino dos compostos **3a** e **3b**.

Conclusões

A metodologia sintética escolhida para obtenção dos pirazóis **3a,b** mostrou ser eficiente. Os átomos de flúor atuaram como bases de Lewis e os átomos de cloro e bromo atuaram como σ -hole nas interações.

Agradecimentos

CNPq, CAPES e FAPERGS pelo apoio financeiro.

¹ Martins, M. A. P.; Moreira, D. N.; Frizzo, C. P.; Campos, P. T.; Longhi, K.; Marzari, M. R. B.; Zanatta, N.; Bonacorso, H. G. *J. Mol. Struct.* **2010**, *969*, 111.

² Clark, T.; Hennemann, M.; Muray, J. S.; Politzer, P. *J. Mol. Model.* **2007**, *13*, 291