

Estudo Estrutural de Semicarbazonas por difração de Raios-X: Efeito indireto do substituinte no empacotamento cristalino

Patrick T. Campos (PG)¹, Susiane Cavinatto (PG)¹, Nilo Zanatta (PQ)¹, Marcos A. P. Martins (PQ)¹, Helio G. Bonacorso (PQ)¹. *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, Ligações de Hidrogênio.

Introdução

Semicarbazonas apresentam um amplo perfil farmacológico e constituem uma importante classe de compostos cujas propriedades têm sido extensivamente estudadas na Química Medicinal, particularmente, na Química Medicinal Inorgânica.¹

Devido à importância das semicarbazonas e como uma continuação da investigação sobre as características estruturais desta classe de compostos, neste trabalho nós relatamos os resultados da determinação estrutural por difração de Raios-X de três compostos.

Resultados e Discussão

O composto **1** foi o único que apresentou duas moléculas independentes na unidade assimétrica. O fragmento O(12)C(11)N(12)N(13)C(14) mostrou ser essencialmente plano com o desvio do plano do r.m.s. de 0,0422, 0,0484 e 0,0430 Å, para os compostos **1**, **2** e **3** (Figura 1), respectivamente. Em cada molécula, o anel de cinco membros 4,5-diidropirazol é plano, com o desvio do plano do r.m.s. de 0,0278, 0,0122 e 0,0946 Å, para os compostos **1**, **2** e **3**, respectivamente. O ângulo interplanar encontrado entre o anel 4,5-diidropirazol e o fragmento O(12)C(11)N(12)N(13)C(14) foi de 18,71(5), 24,27(14) e 9,26(26)° para os compostos **1**, **2** e **3**, respectivamente. Já o ângulo interplanar encontrado entre o anel fenila e o fragmento O(12)C(11)N(12)N(13)C(14) foi de 8,28(9), 39,88(9) e 21,77(24)° para os compostos **1**, **2** e **3**, respectivamente. Esses valores encontrados apresentam pequenas torções entre os três fragmentos (4,5-diidropirazol, O(12)C(11)N(12)N(13)C(14) e fenila) o que pode indicar uma ausência de uma ressonância eletrônica efetiva ao longo de todo o sistema.

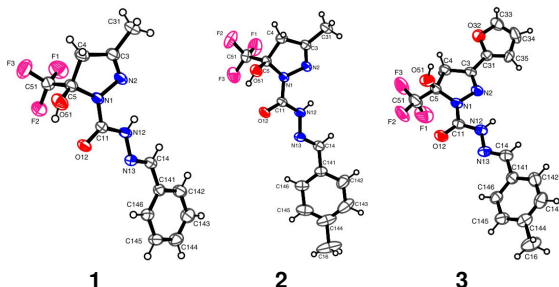


Figura 1. Estrutura dos compostos 1-3.

34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

A presença das ligações de hidrogênio intramoleculares do tipo O(51)-H(51)⋯O(12) mostram estabilizar a posição do grupo carbonila nas moléculas **1** e **2**, com distâncias interatômicas para O(51)⋯O(12) de 2,729(2) e 2,697(3) Å, respectivamente. Esses padrões geraram pseudoanéis de seis membros condensados ao anel pirazolínico.

O composto **1** apresentou as ligações de hidrogênio N(12)-H(12)⋯O(61) (x+1,y,z) e N(62)-H(62)⋯O(12) (x, y, z) com distâncias interatômicas de 2,883(2) e 2,966(2) Å, para N(12)⋯O(61) e N(62)⋯O(12), respectivamente. O composto **2** apresentou a ligação de hidrogênio N(12)-H(12)⋯O(12) (x,-y+1/2,z+1/2) com distância interatômica de 2,943(3) Å para N(12)⋯O(12). Estes dois compostos apresentaram o mesmo tipo de empacotamento cristalino (Figura 2). O composto **3** apresentou a ligação de hidrogênio O(51)-H(51)⋯O(12) (x+1,y,z) com distância interatômica de 2,882(4) Å para O(51)⋯O(12) (Figura 2). Todos os compostos formam cadeias infinitas ao longo de um plano. As distâncias interatômicas encontradas foram menores que a soma dos raios de van der Waals dos átomos envolvidos².

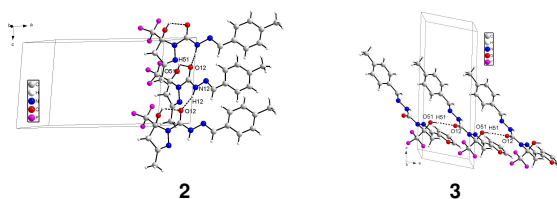


Figura 2. Empacotamento cristalino dos compostos 2 e 3.

Conclusões

A adição de uma metila na fenila do composto **2** não alterou o empacotamento cristalino comparado com **1**. Já a mudança de metila para um grupo volumoso como furan-2-il, na posição três da pirazolina, em **3** levou a um diferente arranjo estrutural.

Agradecimentos

CNPq, CAPES e FAPERGS pelo apoio financeiro.

¹ Beraldo, H. *Quim. Nova*, **2004**, *27*, 461.

² Sobczyk, L.; Grabowski, S.J.; Krygowski, T.M. *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3513;