

(3)5-(4-Metoxifenil)-1H-pirazol: Um tetrâmero supramolecular

Marcos A. P. Martins (PQ)¹, Dayse N. Moreira (PQ)*¹, Kelvis Longhi (PG)¹, Patrick T. Campos (PG)¹, Alexandre R. Meyer (IC)¹, Nilo Zanatta (PQ)¹, Helio G. Bonacorso (PQ)¹. *daysemoreira@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: tautomerismo, tetrâmero, estrutura molecular, NH-pirazol.

Introdução

O fenômeno conhecido como *tautomerismo* é um dos mais curiosos aspectos da química orgânica, e refere-se a compostos existentes em um equilíbrio entre duas ou mais formas isoméricas, chamadas *tautômeros*.¹ Dois tautômeros são possíveis para o composto heterocíclico NH-pirazol, onde a disposição dos átomos de nitrogênio das posições 1 e 2 pode levar a pelo menos cinco estruturas supramoleculares: *dímero*, *trímero*, *tetrâmero*, *hexâmero* e *catêmero*. Estas estruturas supramoleculares de NH-pirazóis podem ser agrupadas em duas classes: (i) trímeros e catêmeros; e (ii) dímeros, tetrâmeros e hexâmeros. A primeira classe consiste de compostos com substituintes não volumosos nas posições 3 e/ou 5, enquanto que na segunda estão os que apresentam grupos volumosos nestas mesmas posições.² A diversidade de redes cristalinas é devida, principalmente, aos possíveis arranjos originados das ligações de hidrogênio intermoleculares N-H...N.³

Assim, dando continuidade a investigação das características estruturais de compostos heterocíclicos, o objetivo deste trabalho é relatar os resultados da determinação estrutural por difração de raios-X de (3)5-(4-metoxifenil)-1H-pirazol.

Resultados e Discussão

Inicialmente, os cristais de (3)5-(4-metoxifenil)-1H-pirazol foram obtidos através da evaporação lenta de CHCl₃ à temperatura ambiente. Este composto, estudado através de dados da difração de raios-X, cristalizou no sistema cristalino monoclinico e grupo espacial C₂/c com duas moléculas independentes na unidade assimétrica. Para melhor visualização da figura (ORTEP) uma das moléculas foi omitida (Figura 1).

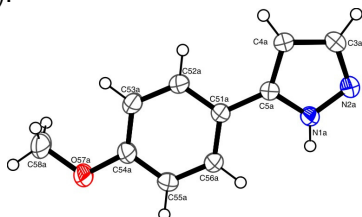


Figura 1. ORTEP do (3)5-(4-metoxifenil)-1H-pirazol.

34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

O anel pirazólico é planar, apresentando o desvio do plano do r.m.s. de 0,0020 Å, e o ângulo entre o plano do anel heterocíclico e o substituinte arila é de 11,24(10)°, mostrando que os anéis estão quase no mesmo plano, indicando uma possível ressonância eletrônica entre eles. A estrutura supramolecular do composto em estudo foi encontrada na forma de um tetrâmero (Figura 2). As interações intermoleculares formada pelos átomos de N do anel pirazólico apresentaram distâncias interatômicas de 2,844 Å para N(1A)···N(2B), 2,855 Å para N(1B)···N(1A), 2,844 Å para N(2B)···N(1A) e 2,844 Å para N(2A)···N(2A). Estas distâncias são menores que a soma dos raios de van der Waals dos átomos envolvidos nestas interações.⁴

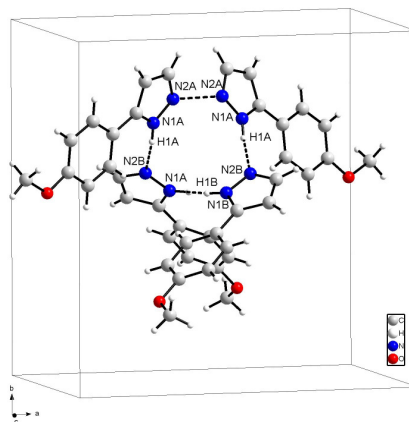


Figura 2. Representação do tetrâmero formado.

Conclusões

A estrutura supramolecular encontrada (tetrâmero) para o NH-pirazol pertence à segunda classe, devido à presença de um substituinte volumoso (4-MeO-C₆H₅).

Agradecimentos

CNPq, CAPES e FAPERGS pelo apoio financeiro.

¹ Gold, V. *Pure Appl. Chem.* **1979**, *51*, 1725.

² Foces-Foces, C.; Alkorta, I.; Elguero, J. *Acta Crystallogr., Sect. B* **2000**, *B56*, 1018.

³ Claramunt, R. M.; Cornago, P.; Verónica P. T.; Pinilla, E.; Torres, M. R.; Samat, A.; Lokshin, V.; Elguero, J. *J. Org. Chem.* **2006**, *71*, 6881.

⁴ Pyykkö, P. *Chem. Rev.* **1997**, *97*, 597.