

Síntese e Análise Estrutural de 2-ciano-1-(5-trifluormetil)-5-hidróxi-3-metil-4,5-diidro-1H-pirazol-1-il)-3-dimetilamino-2-propen-1-ona

Carolini F. Bacim (PG)*¹, 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
*caroliniferrari@gmail.com

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

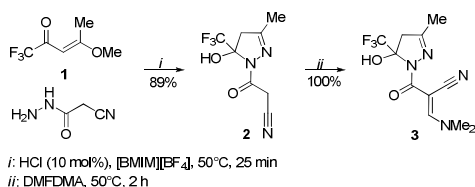
Palavras Chave: Raios-X, 4,5-diidro-pirazol, β -Enaminonas.

Introdução

Os anéis pirazolínicos apresentam numerosas aplicações nos campos da farmacologia e agroquímica.¹ O uso destes compostos em campos tão diversos pode ser explicado por suas diferentes propriedades físicas e químicas e, também, por sua estrutura molecular. Devido à importância destes heterociclos e em continuação a investigação sobre as suas características estruturais, neste trabalho nós relatamos a síntese e os resultados obtidos na determinação estrutural por difração de Raios-X de um composto 4,5-diidro-pirazol contendo um fragmento enaminona.

Resultados e Discussão

A rota sintética para obtenção da pirazolina estudada neste trabalho envolveu duas etapas: (i) ciclocondensação entre a enona **1** e cianoacetidrazida formando a pirazolina **2** e (ii) condensação da pirazolina **2** com DMFDMA gerando o composto **3** (Esquema 1).



Esquema 1. Rota sintética para obtenção do composto **3**.

O desvio do r.m.s. encontrado para o anel pirazolínico do composto **3** (Figura 1) foi de 0,0552 Å indicando que este heterociclo é essencialmente plano. O fragmento β -enaminona apresentou um valor para o desvio do r.m.s. de 0,0458 Å, confirmando que este sistema também é plano. O ângulo encontrado entre o plano do anel pirazolínico e o plano da porção β -enaminona foi de 25,00(9)°.

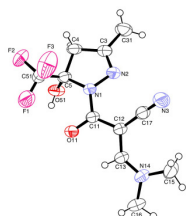


Figura 1. Estrutura do composto **3**.

34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Foi verificada a presença da ligação de hidrogênio intramolecular O(51)–H(51)···O(11) estabilizando a posição do grupo carbonila em **3**. Esta interação gera um pseudo-anel de seis membros condensado ao anel pirazolínico (Figura 2). A distância interatômica encontrada para O(51)···O(11) foi de 2,8045(16) Å.

O empacotamento cristalino de **3** foi estabilizado por ligações de hidrogênio intermoleculares envolvendo os grupos hidroxila e carbonila. Esta interação teve como resultado a formação de um pseudo-anel de quatro membros e dímeros supramoleculares (Figura 2). A distância interatômica encontrada para O(51)···O(11) foi de 2,7747(16) Å (-x+1,-y+1,-z+2). As distâncias interatômicas encontradas nas ligações de hidrogênio são menores que a soma dos raios de van der Waals entre os átomos envolvidos.² Além disso, estes dímeros estão conectados por fracas ligações de hidrogênio do tipo C-H···N.

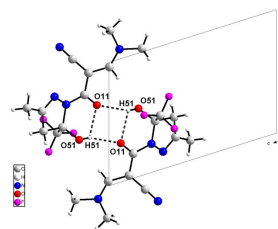


Figura 2. Empacotamento cristalino do composto **3**.

Conclusões

A rota sintética escolhida para a obtenção do composto **3** mostrou ser eficiente, podendo este composto ser utilizado como um novo precursor na síntese de heterociclos, visto que este apresenta três centros eletrofílicos. Além disso, foi observado que a presença dos grupos hidroxila e carbonila determinou o tipo de empacotamento cristalino.

Agradecimentos

CNPq, CAPES e FAPERGS pelo apoio financeiro.

¹ Srivastava, B.K.; Joharapurkar, A.; Raval, S.; Patel, J.Z.; Soni, R.; Raval, P.; Gite, A.; Goswami, A.; Sadhwani, N.; Gandhi, N.; Patel, H.; Mishra, B.; Solanki, M.; Pandey, B.; Jain, M.R.; Patel, P.R. *J. Med. Chem.* **2007**, *50*, 5951.

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