

ESTUDO EXPERIMENTAL E TEÓRICO DE 3,3'-ARIL-5,5'-BIS-1,2,4-OXADIAZOLIL PROPAN-2-ONA.

Carlos Jonnatan Pimentel Barros^{1*} (PG), Jucleiton J. Rufino de Freitas¹ (PG), Suelâeny Aparecida de Andrade¹ (IC), Phelipe Matheus de Moraes Cavalcante² (IC), João R. de Freitas Filho¹ (PQ). E-mail: carlos.jonnatan@pgq.ufrpe.br

¹Departamento de Química da Universidade Federal Rural de Pernambuco – Dois Irmãos – Recife – PE.

²Unidade Acadêmica de Garanhuns - Universidade Federal Rural de Pernambuco – Av. Bom Pastor – Garanhuns-PE

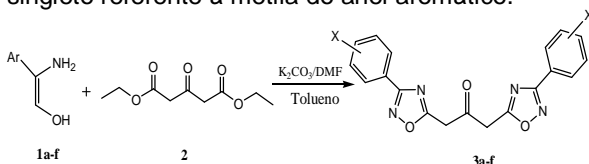
Palavras Chave: 1,2,4-oxadiazol, experimento, caracterização

Introdução

Dentre as áreas de estudo da síntese orgânica, a química de carboidratos, a química de compostos heterocíclicos e a química de compostos quirais têm grande interesse por parte de pesquisadores por frequentemente possibilitarem a obtenção de compostos biologicamente ativos. Os 1,2,4-oxadiazóis são compostos que têm atraído a atenção de muitos pesquisadores devido à sua ampla gama de atividades biológicas¹. Além disso, alguns 1,2,4-oxadiazóis também têm sido utilizados como fungicidas e inseticidas. Esses compostos apresentam várias propriedades biológicas entre elas propriedades farmacológicas. Os oxadiazóis são conhecidos desde 1884² quando Tiemann e Kruger sintetizaram o primeiro composto desta série. Devido a importância biológica dos 1,2,4-oxadiazóis foi realizado a síntese e caracterização de uma série de novos 3,3'-aril-5,5'-bis-1,2,4-oxadiazolil propan-2-ona, bem como estudo teórico da série.

Resultados e Discussão

A síntese dos 3,3'-Arl-5,5'- bis-1,2,4-oxadiazolil propan- 2-ona (**3a-f**), foi realizada sob refluxo e consistiu em reagir as arilamidoximas (Ar: fenil, *p*-toluil, *p*-clorofenil, *p*-metoxifenil, *p*-bromofenil, *p*-nitrofenil), separadamente, com 3-oxoglutarato de etila, tolueno, DMF e K₂CO₃(esquema 1). As estruturas dos 3,3'-Arl-5,5'-bis-1,2,4-oxadiazolil propan-2-ona (**3a-f**), obtidos foram elucidadas através da análise IV, RMN ¹H. O espectro de RMN ¹H a 300MHz do composto **3b** mostrou na região δ 2,36 ppm um singleto referente ao próton metilênico vizinho a carbonila e na região δ 2,96 ppm, um singleto referente à metila do anel aromático.



X = H, *o*-CH₃, *m*-CH₃, *p*-CH₃, *p*-Cl, *p*-Br, *p*-NO₂, *p*-OCH₃.
ESQUEMA 1

Levando em consideração a importância dos 1,2,4-oxadiazóis, decidiu-se realizar cálculos dos orbitais moleculares usando o método semi-empírico

3⁴ Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

(AM1)³ e o *ab initio* (Hartree-Fock). Inicialmente, as moléculas foram examinadas usando os cálculos semi-empíricos com o método AM1, pelo fato de economia de tempo. O resultado do método semi-empírico mostrou que o anel aromático está no mesmo plano que o anel heterociclo, em todos os compostos. Energias totais (ET) e momentos de dipolo (m) para os seis novos compostos, **3a-f**, foram calculados pelos métodos AM1 e HF/6-31G. O composto de menor energia pelo método de AM1, foi o **3f** (E=0,072) e o de maior energia foi **3c** (E=0,211). Pelo método *ab initio* com base HF/6-31G, o composto de maior energia, também foi o **3c**. Para fazer uma comparação, foram utilizados os resultados obtidos pelo método *ab initio* com base HF/6-31G. Os dados dos ângulos de ligação de todos os seis compostos são mostrados na tabela 1.

Tabela 1. Ângulos de ligação da série de oxadiazol

Método	O1-N2-C3	N2-C3-N4	C3-N4-C5	N4-C5-O1	C5-O1-N2
AM1	107,47°	110,26°	104,04°	109,65°	108,57°
HF	103,26°	113,19°	104,51°	111,96°	107,08°

Conclusões

Foram sintetizados seis novos 3,3'-Arl-5,5'-bis-1,2,4-oxadiazolil-propan-2-ona (**3a-f**), a partir de diferentes arilamidoximas e o oxoglutarato de etila em presença de carbonato de potássio (K₂CO₃), DMF e usando como solvente o THF. Os cálculos para a otimização da geometria dos compostos **3a-f** foi realizado através do método AM1 e HF. O resultado do método semi-empírico mostrou que o anel aromático está no mesmo plano que o anel heterociclo, em todos compostos. As estruturas dos compostos foram caracterizadas por RMN ¹H e ¹³C e IV.

Agradecimentos

CNPq, CAPES e FACEPE pelo suporte financeiro.

¹ Hennen, W. J.; Robins, R. K. *Journal of Heterocyclic Chemistry*, **1985**, *22*, 1747.

² Tiemann, F. E.; Kruger, P.. *Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft.*, **1884**, *17*, 1685.

³ Dewar, M. J. S.; Zoebisch, E. G.; Heally, E. F.; Stewart, J. J. P. *J. Am. Chem. Soc.* **1985**, *107*, 3902.