

47. **Dissertação:** “Estudo da Formação de Compostos Meso-iônicos Pertencentes aos Sistemas 1,3,4-Tiadiazólio-2-fenilamina e 1,3,4-Triazólio-2-~~tiol~~”.

Autor(a): Maria Aparecida Medeiros Maciel

Orientador(a): Prof. Victor Marcos Rumjanek

Data da Defesa: 29/07/1991

Resumo: A formação de novos compostos meso-iônicos pertencentes aos sistemas 1,3,4-tiadiazólio (**115**) e 1,3,4-triazólio (**116**) foi investigada através da reação entre 1,4-difeniltiossemicarbazida (**112**) e cloretos de ácidos aromáticos (**113a-113c**). Foi verificado que esta reação realizada em condições anidras fornece os ácidos conjugados correspondentes ao sistema 1,3,4-tiadiazólio (**115**), os quais, em meio básico, sofrem rearranjo, fornecendo os sais correspondentes ao sistema 1,3,4-triazólio (**116**), sendo que os intermediários aciltiossemicarbazidas (**114**) foram isolados e caracterizados. Realizou-se também um estudo cinético qualitativo desta reação através de espectroscopia na região do I.V., observando-se, como era esperado, a influência dos efeitos eletrônicos dos substituintes na velocidade da reação. As estruturas dos compostos sintetizados foram determinadas através de espectroscopia na região do I.V., espectrometria de RMN ¹³C e de massa, além de estudo de difração de raio X para o composto **115b**. Cálculos teóricos foram realizados para determinação da ordem de ligação $\pi + \sigma$ e π , ângulos e comprimentos de ligação que, comparados com os dados obtidos a partir de difração de raios X, do composto **115b**, revelaram boa concordância.