

50. **Dissertação:** “Síntese, Estrutura e Cinética das Reações de S NAr de Aril-Sidnonas”.

Autor(a): Viviane Rodrigues Braz

Orientador(a): Profa. Aurea Echevarria Neves de Lima

Data da Defesa: 26/03/92

Resumo: Os compostos mesoiônicos são heterocíclicos cuja síntese tem mostrado grande interesse principalmente por sua potencial atividade biológica e por participarem em diversas reações originando novos compostos heterocíclicos. Baseados nestes fatores sintetizamos e caracterizamos seis novos compostos mesoiônicos da classe das sidnonas: 3-N-[4-X-3-nitrofenil]-1,2,3-oxadiazólio-5-olato, onde X= cloro, pirrolidino, piperidino, morfolino, metoxi e ciclohexilamino. As estruturas dos compostos sintetizados foram verificadas através de espectroscopia de infravermelho, ultravioleta, RMN ^1H e ^{13}C e espectrometria de massa. Estudos quantitativos das reações de substituição nucleofílica aromática frente aos nucleófilos metóxido de sódio, piperidino e ciclohexilamina, foram realizados utilizando-se como substrato a 3-N-[4-cloro-3-nitrofenil] sidnona, onde o anel mesoiônico foi considerado como um grupo substituinte. Foram determinados os coeficientes de velocidade das reações à várias temperaturas e calculados os parâmetros de ativação. Verificou-se que os parâmetros de ativação estavam de acordo com a força dos nucleófilos utilizados e com o caráter excepcional do anel mesoiônico como substituinte. O efeito do solvente também foi estudado, e a diferença no comportamento do substrato, frente à metanol e N, N-dimetil formamida, foi verificada da maneira prevista. As 3-N[4-X-3-nitrofenil] sidnonas, onde X= cloro, pirrolidino, piperidino e morfolino, foram testadas contra tumores experimentais em camundongos. Os compostos cloro e pirrolidino-substituídos, mostraram inibição significativa dos tumores e aumento da sobrevivência dos animais tratados.