

51. **Dissertação:** “Síntese, Espectroscopia e Correlações de Energia Livre de Novos Heterocíclicos Mesoioônicos da Classe dos 1,3,4-Tiadiazólio-2-Fenilamina”.

**Autor(a):** Ana Cristina Souza dos Santos

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

**Data da Defesa:** 27/03/92

**Resumo:** Os compostos mesoioônicos são heterocíclicos dotados de estrutura não clássica cuja síntese tem mostrado interesse principalmente por serem potencialmente ativos biologicamente. Sintetizamos uma série de 11 novos derivados contendo grupamentos cinamoílas m- e p-substituídos da classe dos 1,3,4-tiadiazólio-2-fenilamina, precursores dos correspondentes mesoioônicos. Esses compostos não estão descritos na literatura e foram caracterizados por espectrometria de infravermelho, ultravioleta, RMN  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  e espectrometria de massa. Foram estudadas as relações lineares de energia livre, considerando-se os deslocamentos químicos de RMN  $^{13}\text{C}$  contra as constantes dos substituintes ( $\sigma$ ) e os parâmetros duais  $\sigma_{\text{I}}$ ,  $\sigma_{\text{R}}$ , F e R. Observou-se que os efeitos dos substituintes no anel arila do grupo cinamoíla eram transmitidos através da ligação homopolar aos carbonos C-2 e C-5 do anel mesoioônico, sendo que o efeito de ressonância apresentava-se como mais significativo, evidenciando uma conjugação estendida do substituinte do átomo de nitrogênio exocíclico ligado ao anel heterocíclico. Observou-se também que os deslocamentos químicos dos C $\alpha$  e C $\beta$  do grupamento cinamoíla apresentam boas correlações com os efeitos dos substituintes, tanto nos compostos heterocíclicos como nos ácidos cinâmicos; sendo que o efeito de ressonância foi mais significativo para o C $\beta$  e o indutivo para o C $\alpha$ , conforme esperado.