



## ESTUDO DAS CONDIÇÕES REACIONAIS PARA SÍNTESE DO 1-(3-(*p*-BROMO)-1,2,4-OXADIAZOL-5-IL)PROPAN-2-ONA E AVALIAÇÃO TOXICOLÓGICA

Vitória Dutra Dantas<sup>1</sup>, Juliano Carlo Rufino de Freitas<sup>2</sup>

### RESUMO

Os oxadiazóis são compostos heterocíclicos que apresentam inúmeras aplicações biológicas, uma vez que atuam como pró-fármacos das amidinas e núcleos direcionadores. Nesse sentido, faz-se necessária a busca por metodologias sintéticas e avaliar a toxicidade desses compostos, por isso, o presente estudo objetivou a análise das condições reacionais para a obtenção e caracterização do 1-(3-(*p*-bromo)-1,2,4-oxadiazol-5-il)etan-1-ona, e avaliar a sua toxicidade em *Artemia salina*. A princípio, sintetizou-se a *p*-bromobenzamidoxima utilizando *p*-bromobenzonitrila, cloridrato de hidroxilamina e carbonato de potássio (K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) em meio hidroalcoólico com rendimento de 83%. Em seguida, ocorreu a síntese do 1-(3-(*p*-bromo)-1,2,4-oxadiazol-5-il)etan-1-ona utilizando *p*-bromobenzoamidoxima, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, piruvato de etila e dimetilformamida (DMF) sob irradiação de micro-ondas em potências de 80, 90 e 100%, obtendo rendimentos de 90,5, 93,5 e 82% respectivamente. Após o processo de síntese, essas moléculas foram caracterizadas por técnicas espectroscópicas de IV, RMN <sup>1</sup>H e RMN <sup>13</sup>C e afirmando suas estruturas. O 1-(3-(*p*-bromo)-1,2,4-oxadiazol-5-il)etan-1-ona apresentou uma CL<sub>50</sub> foi 24,34 µg/mL indicando uma alta toxicidade em relação aos microcrustáceos testados. Em suma, esses resultados estimulam futuras pesquisas sobre essa classe de compostos e seu mecanismo de ação.

**Palavras chave:** 1,2,4-oxadiazóis, *Artemia salina* e bioensaio toxicológico.

---

<sup>1</sup> Aluna de Farmácia, Unidade Acadêmica de Saúde, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: vitoria.dutra@estudante.ufcg.edu.br

<sup>2</sup> Doutor em Química, Professor, Unidade Acadêmica de Biologia e Química, UFCG, Campina Grande, PB, email: julianocrf@gmail.com

# STUDY OF THE REACTION CONDITIONS FOR THE SYNTHESIS OF 1-(3-(*p*-BROMO)-1,2,4-OXADIAZOL-5-YL)PROPAN-2-ONE AND TOXICOLOGICAL EVALUATION.

## ABSTRACT

Oxadiazoles are heterocyclic compounds that have numerous biological applications, since they act as prodrugs of amidines and targeting nuclei. In this sense, it is necessary to search for synthetic methodologies and evaluate the toxicity of these compounds. Therefore, the present study aimed to analyze the reaction conditions to obtain and characterize 1-(3-(*p*-bromo)-1,2,4-oxadiazol-5-yl)ethan-1-one, and to evaluate its toxicity in *Artemia salina*. Initially, *p*-bromobenzamidoxime was synthesized using *p*-bromobenzonitrile, hydroxylamine hydrochloride and potassium carbonate ( $K_2CO_3$ ) in a hydroalcoholic medium with a yield of 83%. Then, the synthesis of 1-(3-(*p*-bromo)-1,2,4-oxadiazol-5-yl)ethan-1-one using *p*-bromobenzoamidoxime,  $K_2CO_3$ , ethyl pyruvate and dimethylformamide (DMF) under microwave irradiation at powers of 80, 90 and 100%, obtaining yields of 90.5, 93.5 and 82% respectively. After the synthesis process, these molecules were characterized by IR,  $^1H$  NMR and  $^{13}C$  NMR spectroscopic techniques, confirming their structures. 1-(3-(*p*-bromo)-1,2,4-oxadiazol-5-yl)ethan-1-one presented an  $LC_{50}$  of 24.34  $\mu g/mL$  indicating high toxicity towards the microcrustaceans tested. In short, these results encourage future research on this class of compounds and their mechanism of action.

**Key words:** 1,2,4-oxadiazoles, *Artemia salina* and toxicological bioassay.