



ESTUDO DAS CONDIÇÕES REACIONAIS VISANDO A SÍNTESE DO 1-(5-FENIL-1,2,4-OXADIAZOL-3-IL)PROPAN-2-ONA E AVALIAÇÃO TOXICOLÓGICA

Lívia Gouveia de Farias¹, Juliano Carlo Rufino de Freitas²

RESUMO

A química medicinal é uma área interdisciplinar que proporciona a descoberta e desenvolvimento de novos candidatos a fármacos, os quais podem auxiliar ou serem novas terapias farmacológicas para o enfrentamento das comorbidades da sociedade. Nesse sentido, uma classe de compostos com elevada notoriedade são os 1,2,4-oxadiazóis 3,5-dissubstituídos, uma vez que exibem diversas propriedades biológicas, a citar, atividade antitumoral, anti-inflamatória, antimicrobiana e leishmanicida. Diante da perspectiva do desenvolvimento de novos candidatos a fármacos, objetivou-se realizar um estudo das condições reacionais para a obtenção do (3-fenil-1,2,4-oxadiazol-5-il)metanol a partir da reação da benzamidoxima e o acetoacetato de etila em meio básico, caracterizá-lo através de técnicas espectrométricas e avaliar sua toxicidade frente a *Artemia salina*. Como resultado, a benzamidoxima foi sintetizada após 24h de reação, sendo obtida com 82,7% de rendimento. O (3-fenil-1,2,4-oxadiazol-5-il)metanol foi obtido com 78% de rendimento utilizando a irradiação de micro-ondas, e os espectros de IV e RMN ¹H e RMN ¹³C confirmam a formação desse composto. Por fim, a concentração letal para matar 50% dos indivíduos (CL₅₀) do (3-fenil-1,2,4-oxadiazol-5-il)metanol foi de 52,74 µg/mL com desvio padrão de ± 2,35 µg/mL, e intervalo de confiança de 95%, indicando elevada toxicidade. Em suma, esses resultados indicam a potencialidade do (3-fenil-1,2,4-oxadiazol-5-il)metanol e a necessidade de estudos complementares.

Palavras-chave: Química medicinal, Heterocíclico, *Artemia salina*.

¹Graduanda do Curso de Bacharelado em Farmácia, Unidade acadêmica de saúde, UFCG, Cuité-PB, e-mail: livia.gouveia@estudante.ufcg.edu.br

²Doutor em Química, Professor Associado III, Unidade Acadêmica de Biologia e Química, UFCG, Cuité-PB, e-mail: julianocrf@gmail.com

STUDY OF REACTIONAL CONDITIONS AIMING FOR THE SYNTHESIS OF 1-(5-PHENYL-1,2,4-OXADIAZOLE-3-YL)PROPAN-2-ONE AND TOXICOLOGICAL EVALUATION

ABSTRACT

Medicinal chemistry is an interdisciplinary area that provides the discovery and development of new drug candidates, which can help or be new pharmacological therapies to combat comorbidities in society. In this sense, a class of compounds with high notoriety are the 3,5-disubstituted 1,2,4-oxadiazoles, as they exhibit several biological properties, including antitumor, anti-inflammatory, antimicrobial and leishmanicidal activity. Given the perspective of developing new drug candidates, the objective was to carry out a study of the reaction conditions for obtaining (3-phenyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)methanol from the reaction of benzamidoxime and ethyl acetoacetate in a basic medium, characterize it using spectrometric techniques and evaluate its toxicity against *Artemia salina*. As a result, benzamidoxime was synthesized after 24 hours of reaction, obtaining 82.7% yield. (3-phenyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)methanol was obtained in 78% yield using microwave irradiation, and the IR and ¹H NMR and ¹³C NMR spectra confirm the formation of this compound. Finally, the lethal concentration to kill 50% of individuals (LC₅₀) of (3-phenyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)methanol was 52.74 µg/mL with a standard deviation of ± 2.35 µg/mL, and a 95% confidence interval, indicating high toxicity. In short, these results indicate the potential of (3-phenyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)methanol and the need for additional studies.

Keywords: Medicinal chemistry, Heterocyclic, *Artemia salina*.