# Novas Imidazolidinas 2-tioxo-4-ona: Síntese e Estudo Termodinâmico

<u>José Alixandre de Sousa Luis</u> (PG), Michaelle Santos Lima<sup>2</sup> (PG), Petrônio Filgueiras de Athayde Filho<sup>2</sup> (PQ), José Régis Botelho<sup>2</sup> (PQ), Alexsandro Fernandes dos Santos (IC)<sup>2</sup>, Joseph Miller (PQ)<sup>1</sup>. alixjo@bol.com.br

Palavras Chave: Imidazolidinas, síntese, análise térmica.

#### Introdução

A comunidade científica tem se interessado pelos compostos heterocíclicos sintéticos na busca por novos compostos úteis no tratamento de diversas doenças. Modificações na estrutura do anel imidazolidínico, como a troca de um átomo de oxigênio por um átomo de enxofre, podem alterar suas propriedades químicas, físicas e biológicas. Dessa forma, é importante investigar a estabilidade térmica dessas moléculas para assegurar sua eficiência como agente terapêutico. Assim, foram sintetizados os derivados 3-fenil-5-(4-isopropilfenil)-2tioxo-imidazolidina-4-ona (HPA-03), 1-metil-3-fenil-5-(4-metilfenil)-2-tioxo-imidazolidina-4-ona (HPA-06), 3fenil-5-(4-metoxifenil)-2-tioxo-imidazolidina-4-ona (HPA-08), 3-fenil-5-(4-etilfenil)-2-tioxo-imidazolidina-4-3-fenil-5-(4-clorofenil)-2-tioxoona (HPA-11), imidazolidina-4-ona (HPA-13) e 1-metil-3-fenil-5-(4etilfenil)-2-tioxo-imidazolidina-4-ona (HPA-16), com o obietivo de inter-relacionar suas estruturas e estabilidade térmica.

### Resultados e Discussão

Os derivados imidazolidínicos foram obtidos em duas etapas: na primeira, fez-se reagir cianeto de sódio, cloreto de amônio (ou metilamônio) e 4-arilaldeídos seguido de hidrólise ácida para a formação dos aminoácidos derivados da glicina. Na segunda etapa, os aminoácidos obtidos reagiram com fenilisotiocianato seguido de hidrólise ácida<sup>1</sup>, formando os derivados imidazolidínicos.

$$R_1NH_3CI + KCN + CHO R_1NHCHCOOH$$

**Figura 1.** Via de obtenção dos derivados imidazolidínicos.

Os derivados HPA-06 e HPA-16 foram submetidos à análise térmica através de curvas TG dinâmicas e curvas DSC, na razão de aquecimento de 10°C/minuto. As curvas TG apresentaram uma e três 29° Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

etapas, relacionadas a processos de volatilização e decomposição térmica dos compostos.

**Tabela 1.** Resultados das curvas TG dos derivados da 2-tioxo-imidazolidina-4-ona.

Composto	Etapas de Decompos ição	Intervalo de Temperatura (°C)	Perdas de Massa (%)
HPA-06	1	24,33-86,86	25,00
	2	199,21-386,53	65,00
	3	394,02-459,63	2,43
HPA-16	1	163,27-362,39	98,05

As curvas DSC apresentaram duas e quatro transições endotérmicas, referentes a processos de volatilização, fusão e decomposição. Todos os compostos apresentaram curvas semelhantes, exemplificadas pela figura 2.

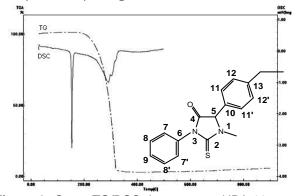


Figura 2. Curva TG/DSC do composto HPA-16.

### Conclusões

As estruturas dos compostos sintetizados foram comprovadas através dos métodos espectroscópicos usuais (IV, RMN <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C). Não foram encontrados registros na literatura dos compostos HPA-03, HPA-06, HPA-08, HPA-11, HPA-13 e HPA-16. O composto que apresentou a maior temperatura inicial de decomposição, portanto a maior estabilidade térmica foi HPA-16. O composto HPA-06 apresentou a menor estabilidade térmica.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Laboratório de Tecnologia Farmacêutica – Universidade Federal da Paraíba - UFPB, Campus I, CEP 58051-970, João Pessoa-PB

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Departamento de Química-CCEN-Universidade Federal da Paraíba-UFPB-João Pessoa-PB

## Agradecimentos