

# SÍNTESE, MODIFICAÇÃO E ELUCIDAÇÃO ESTRUTURAL DE NOVOS DERIVADOS MESOIÔNICOS NA FORMA DE SAIS S-METILADOS.

Alexsandro Fernandes dos Santos<sup>2</sup> (IC)\*, Bruno Freitas Lira<sup>1, 2</sup> (PQ), Petrônio Filgueiras de Athayde Filho<sup>1,2</sup> (PQ), Joseph Miller<sup>1, 2</sup> (PQ), José Regis Botelho<sup>2</sup> (PQ) e Gerd Bruno da Rocha<sup>2</sup> (PQ).

<sup>1</sup> Laboratório de Tecnologia Farmacêutica, UFPB, 58.051-970, João Pessoa - PB, Brasil.

<sup>2</sup> Departamento de Química, UFPB, 58.051-970, João Pessoa - PB, Brasil.

\*E-mail: brunofrlira@hotmail.com

Palavras-chave: Síntese, Mesoiônico, RMN <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C 1D e 2D.

## Introdução

Compostos mesoiônicos<sup>1</sup> são betaínas heterocíclicas assimétricas e não aromáticas estabilizadas por deslocalização de elétrons e cargas separadas sobre duas regiões por ligações simples, de grande interesse químico e físico. Estudos anteriores mostram que derivados mesoiônicos possuem uma larga gama de atividade biológica<sup>2</sup> e propriedades físicas especiais tais como em óptica não-linear<sup>3</sup>. De acordo com esses conceitos, visando futuro aproveitamento para uso em óptica não-linear e atividade biológica, sintetizamos quatro novos derivados mesoiônicos sendo dois do sistema 1,3-tiazólio-5-tiolato **5a** e **5b** e dois 1,3-diazólio-5-tiolato **7a** e **7b** todos na forma de sal S-metilado<sup>4</sup>.

## Resultados e Discussão

A metodologia<sup>4</sup> empregada (Figura 1) envolveu a seguinte rota sintética: (i) reação de Strecker com aldeídos **1**, cianeto de sódio e cloreto de metilamônio forneceu o C-aril-metilglicina **2** com bons rendimento, (ii) aroilação de **2** obteve-se N-metil-N-aril-C-arilglicina **3**, (iii) ciclodesidratação de **3** com anidrido acético seguido de cicloadição e cicloneversão 1,3-dipolar com CS<sub>2</sub> forneceu os mesoiônicos do sistema 1,3-tiazólio-5-tiolato **4a** e **4b** como bases livre, (iv) alquilação de **4a** e **4b** com iodeto de metila obteve-se **5a** e **5b** como sal S-metilado do mesmo sistema e (v) tratamento de **5a** e **5b** com metil amina forneceu **6a** e **6b** como base livre e finalmente pela alquilação de **6a** e **6b** com iodeto de metila obteve-se **7a** e **7b** como sais S-metilados. Em nossos estudos sobre modificação estrutural de compostos mesoiônicos utilizando reação de ciclodesidratação seguido de cicloadição e cicloneversão 1,3-dipolar e alquilação, verificamos que os mesoiônicos do sistema 1,3-tiazólio-5-tiolato **5a** e **5b** foram obtidos a partir da alquilação dos mesoiônicos **4a** e **4b** com iodeto de metila que por sua vez são transformados em derivados mesoiônicos do sistema 1,3-diazólio-5-tiolato **7a** e **7b** a partir das bases livres dos mesoiônicos **6a** e **6b** quando tratados com metilaninas. Segundo o esquema de síntese (Figura 1) preparamos 4 novos compostos mesoiônicos na forma de Sal S-metilado, com rendimentos entre (68 a 89%).

As estruturas dos mesmos foram confirmadas utilizando técnicas de espectrometria

de RMN <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C 1D e 2D, a saber: APT, DEPT, HETCOR e HMBC e confirmadas por estudos de por Análise elementar, Espectroscopia de Infravermelho e Espectrometria de Massa.

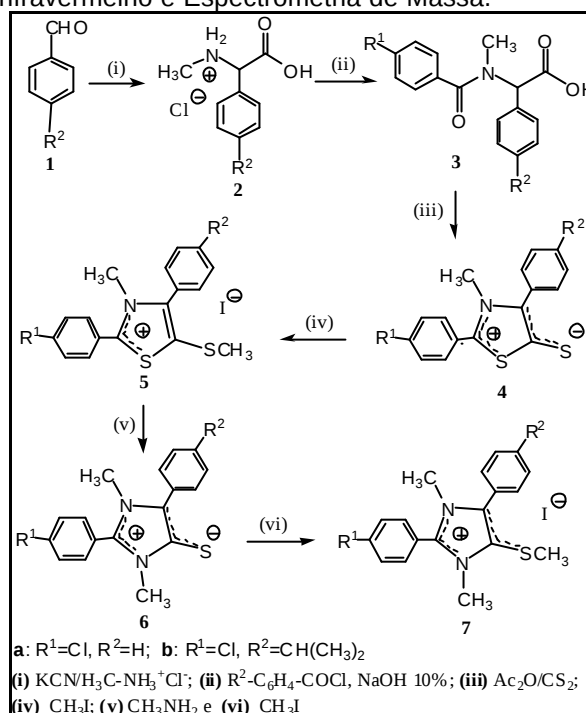


Figura 1. Sequência sintética.

## Conclusões

Partindo do resultado das análises espectroscópicas e espectrométricas acima citadas, podemos afirmar que os produtos obtidos através da rota sintética utilizada se trata realmente dos novos derivados mesoiônicos **5a**, **5b**, **7a** e **7b** na forma de sais S-metilados.

## Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq e CAPES pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> M. B. Oliveira et al., *Phosphorus, Sulfur, Silicon and the Related Elements*. **108**, 75 (1996).

<sup>2</sup> P. F. Athayde-Filho et al., *Acta Farmaceutica Bonaerense*. **18**, 17 (1999).

<sup>3</sup> B. F. Lira et al., *Optics Communications*. **264**, 225 (2006).

<sup>4</sup> P. F. Athayde-Filho, et al., *Synthesis*. **5**, 685 (2003).