

Novas Metodologias Sintéticas para a Obtenção de Mesoioônicos da Classe 1,3,4-Tiadiazólio-2-Aminida

Camilla Moretto dos Reis (PG)* e Aurea Echevarria (PQ)

camillareis@ufrj.br

Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro.

Palavras Chave: mesoioônicos, 1,3,4-tiadiazólio-2-aminida, ultra-som, microondas.

Introdução

Os compostos mesoioônicos, ao longo de décadas, têm sido alvo de inúmeros estudos nas mais diversas áreas de pesquisa, destacando os novos materiais e a química medicinal. Os mesoioônicos apresentam estruturas especiais que proporcionam diferentes possibilidades para a síntese de novas substâncias heterocíclicas¹, além de possibilitar interações com biomoléculas, tais como o DNA e proteínas, fatores importantes que contribuem para explicar suas variadas atividades biológicas².

Nos dias atuais as demandas por processos sintéticos mais limpos e eficientes têm sido consideradas muito relevantes, devido especialmente aos aspectos ambientais. Assim, esta comunicação tem como principal objetivo a síntese de precursores dos mesoioônicos da classe 1,3,4-tiadiazólio-2-aminida, na forma de cloridratos, utilizando duas novas metodologias alternativas: irradiação em forno de microondas e em banho de ultra-som.

Resultados e Discussão

Os mesoioônicos, na forma de sais, foram obtidos por duas metodologias diferentes a partir da reação da 1,4-difeniltiossemicarbazida com o aldeído apropriado na presença de um agente halogenante e 1,4-dioxano como solvente orgânico. Nas duas metodologias fez-se uso de dois agentes halogenantes diferentes, o cloreto de tionila (SOCl₂) e o cloreto de trimetil silano (TMS-Cl). O uso do aldeído e do agente halogenante visou à eliminação de uma etapa de reação em relação à metodologia tradicional, que utiliza o ácido carboxílico e a posterior preparação do cloreto de ácido.

Uma das metodologias consistiu na irradiação por microondas dos reagentes na potência 2 com 5 minutos de reação. Na outra metodologia a irradiação dos reagentes foi feita por ultra-som durante 10 minutos. O esquema 1 mostra a rota sintética para as duas metodologias utilizadas neste trabalho. Na metodologia tradicional, além da necessidade de preparação do cloreto de ácido, a reação levaria no mínimo 24 horas.

Em ambas as metodologias os cloridratos mesoioônicos foram obtidos com bons rendimentos e alto grau de pureza (Tabela 1).

31^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Esquema 1

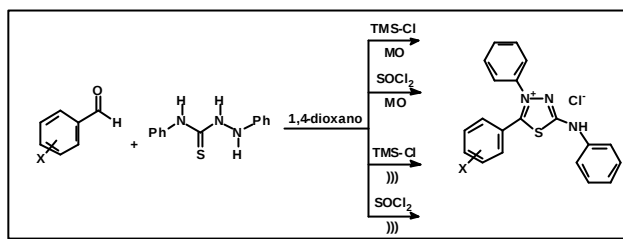


Tabela 1. Rendimento dos cloridratos mesoioônicos obtidos por irradiação de microondas e de ultra-som.

Aldeído	Microondas (%)		Ultra-som (%)	
	TMS-Cl	SOCl ₂	TMS-Cl	SOCl ₂
H-C ₆ H ₅	68	92	89	83
4-OCH ₃ -C ₆ H ₅	41	96	66	74
4-NO ₂ -C ₆ H ₅	95	98	98	83
C ₆ H ₅ -C ₂ H ₂	87	90	73	86
4-(CH ₃) ₂ N-C ₆ H ₄ -C ₂ H ₂	93	91	68	72
2-OCH ₃ -C ₆ H ₄ -C ₂ H ₂	87	95	83	84
Piperonal	74	92	87	87

Os compostos obtidos foram caracterizados por técnicas espectroscópicas de rotina como IV e RMN de ¹H e ¹³C.

Conclusões

As metodologias sintéticas utilizando irradiação de microondas e ultra-som proporcionaram a obtenção dos produtos em curto tempo reacional permitindo, também, a eliminação de uma etapa de reação. As técnicas utilizadas podem ser consideradas bem promissoras na ótica dos conceitos da “química limpa”.

Agradecimentos

UFRRJ / CNPQ

¹Ollis, W.D.; Stanforth, S.P. e Ramsden, C. A. *Tetrahedron* **1985**, 41, 2239.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

²Senff-Ribeiro, A.; Echevarria, A.; Silva, E.F.; Franco, C.R.C.;
Veiga, S.S. e Oliveira, M.B.M. *Brit. J. Cancer* **2004**, 91, 297.