

## Síntese e caracterização de novos compostos mesoiônicos 1,3-diazólio-5-tiolato a partir de mesoiônicos 1,3-tiazólio-5-tiolato

Juliana A. Figueiroa (PG)<sup>2</sup>, Helivaldo D. S. Souza (PG)<sup>2</sup>, Normando A. S. Costa (PG)<sup>2</sup>, Cleudaldo S. Oliveira (PG)<sup>2</sup>, Maria C. R. Brandão\* (PG)<sup>2</sup>, Bruno F. Lira (PQ)<sup>1,2</sup>, Petrônio F. de Athayde-Filho (PQ)<sup>1,2</sup>, José M. B. Filho (PQ)<sup>1</sup>.

<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: mcrbrandaao@hotmail.com

Palavras-chave: Síntese, Mesoiônico, modificação estrutural.

### Introdução

Nossa linha de pesquisa vem sendo estruturada a síntese de compostos mesoiônicos que apresentam estruturas que possibilitam a preparação de novos outros heterocíclicos. Compostos mesoiônicos<sup>1</sup> constituem um grupo de betaínas heterocíclicas não-aromáticos, estabilizados por deslocalização de elétrons e cargas separadas por duas regiões através de ligações simples. Esses compostos apresentam uma ampla gama de atividade biológica<sup>2</sup>, com grande possibilidade de aproveitamento na obtenção de fármacos e propriedades físicas<sup>3</sup> especiais, especialmente em óptica não-linear, com elevado potencial de uso tecnológico e por participarem em diversas reações<sup>4</sup> originando novos outros derivados heterocíclicos. O presente trabalho apresenta a obtenção de dois novos compostos mesoiônicos do sistema 1,3-diazólio-5-tiolato **6a** e **6b** com diferentes grupos doadores ( $R^2$ ) e aceptores ( $R^1$ ) de elétrons, obtidos a partir de mesoiônicos do sistema 1,3-tiazólio-5-tiolato 4a e 4b (Figura 1).

### Resultados e Discussão

A metodologia<sup>4</sup> empregada envolveu a seguinte rota sintética: (i) reação de Strecker com aldeído 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 cicl reversão 1,3-dipolar com  $CS_2$  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 cloridrato do mesmo sistema e (v) tratamento de 5a e 5b com metil amina forneceu **6a** e **6b** na forma de bases livre. Os produtos foram todos purificados por recristalização em etanol/água e obtidos com os respectivos rendimentos 79 e 74%.

As estruturas de **6a** e **6b** foram elucidadas por Análise elementar e técnicas espectrais de IV e EM aliado ao uso de técnicas sofisticadas de RMN 1D e 2D (APT, DEPT, HMQC e HMBC).

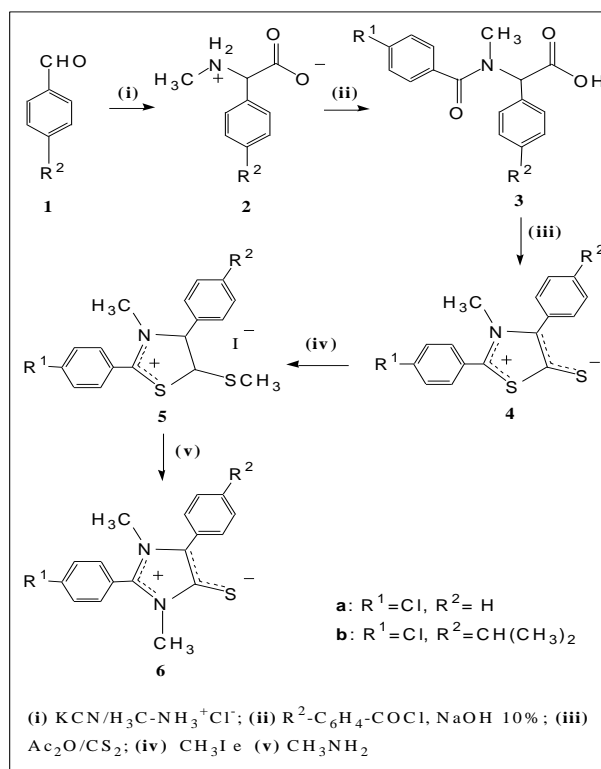


Figura 1. Seqüência sintética.

### Conclusões

A estratégia sintética demonstrou ser adequada, visto os bons rendimentos e facilidade sintética. Os derivados foram devidamente caracterizados e comprovados espectroscopicamente. Testes biológicos estão sendo realizados visando a avaliação de seus potenciais terapêuticos.

### Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq e CAPES pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> Oliveira, M. B. et al., *Phosphorus, Sulfur, Silicon and the Related Elements*, **1996**, 108, 75-84.

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

<sup>3</sup> Moura G. L. C., Simas A. M. and Miller J., *Chem Phys Lett.*, **1996**, 257, 639.

<sup>4</sup> Shiba S et al, *Bulletin of the Chemical Society of Japan.*, **1970**, Vol 43, No. 12, 3941-3942.