

## SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE NOVAS 2-TIOXO-IMIDAZOLIDINAS-4-ONA

Severino A. Souza (PG), Helivaldo D. S. Souza\* (PG), Alynne S. Carvalho (IC), Yuri A. S. Canuto (IC), Maria C. R. Brandão (PG), Anna A. P. Toscano (IC), Petrônio F. Athayde-filho (PQ), Bruno F. Lira (PQ).

Laboratório de Pesquisa em Bioenergia e Síntese Orgânica (LPBS), UFPB, João Pessoa/PB.

sasindustrial@bol.com.br/helivaldog3@gmail.com

**Palavras Chave:** tiohidantoínas, 2-tioxo-imidazolidinas-4-ona e núcleo tioimidazolidínico.

### Introdução

As tiohidantoínas, também denominadas 2-tiohidantoínas ou 2-tioxo-imidazolidinas-4-ona são heterocíclicos pentagonais que apresentam no anel dois átomos de nitrogênio nas posições 1/3, um grupo tioxo na posição 2 e um grupo carbonílico na posição 4. Por sua vez, os núcleos tioimidazolidínico estão presentes em várias moléculas bioativas que atualmente são usadas na clínica médica. A exemplo da fenitoína utilizada na terapêutica, por apresentar propriedades anticonvulsivantes (OLIVEIRA, 2008). Por sua eficácia ela faz parte da relação de Medicamentos Essenciais da Organização Mundial de Saúde e também da Relação Nacional de Medicamentos Essenciais (RNME, do BRASIL, 1999)(LUIZ, 2007).

### Resultados e Discussão

A metodologia de síntese das 2-Tioxo-imidazolidinas-4-ona substituídas IM (05-08) foi realizada em três etapas. A primeira etapa foi à obtenção dos aminoácidos (01) via síntese de Strecker. Na segunda etapa os aminoácidos (01) foram tratados com uma solução aquosa de hidróxido de sódio (0,1 N) seguida da adição do fenilisotiocianato (02) e por fim se fez uma ciclização com ácido clorídrico (6 N) durante 2 horas de refluxo.

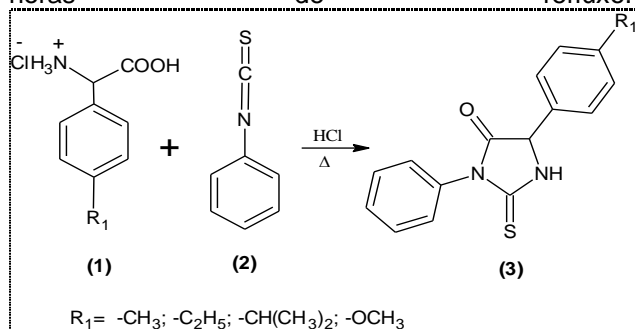


Figura 1: Obtenção das tiohidantoínas

Na última etapa uma mistura de 2-Tioxo-imidazolidinas-4-ona (03) e trietilamina em quantidades (1:2) foram dissolvidas sob agitação mecânica em 15 mL de DCM anidro e deixado sob agitação por 30 minutos foi adicionado lentamente o cloreto de benzoíla (04) ou 4-cloro benzoíla (04). A agitação foi mantida por 3-4 h a temperatura ambiente. Após foi adicionado 10 ml de

34ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

diclorometano e 20 ml de água destilada. A fase orgânica foi separada da fase aquosa e rota-evaporada. O sólido obtido (IM 05-08) foi lavado com água destilada e recristalizada em uma mistura de água destilada/etanol 1:1.

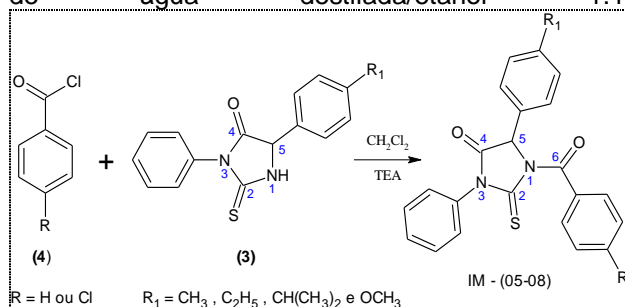


Figura 2: Esquema de obtenção das IMs (05-08)

Os novos compostos foram caracterizados via métodos espectroscópicos de (IV, RMN <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C) e mostraram características similares as dos compostos tioimidazolidínico (03) apenas aparecendo às evidências dos novos substituintes oriundo do cloreto de ácido (04) e/ou 4-cloro benzoíla (04). Os estudos de RMN de <sup>13</sup>C mostraram deslocamentos químicos característicos para os compostos heterocíclicos carbonilados ao redor de 156 e 173 ppm e os tiocarbonilados ao redor de 180 a 183 ppm. Outras evidências foram o desaparecimento do sinal característico de N-H na região entre 9 a 11 ppm e o aparecimento do deslocamento químico referente ao C-5 que ocorre ao redor de 62 ppm nas tiohidantoínas.

### Conclusões

A metodologia para a obtenção das 2-Tioxo-imidazolidinas foi reprodutível, de baixo custo e com bons rendimentos. As técnicas de espectroscopia de IV e RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C foram apropriadas para caracterizar os compostos intermediários e produtos finais.

### Agradecimentos

Apoio Financeiro: Capes e CNPq

Oliveira, S. M.; Hernandes, M. Z.; Silva, B. P.; Lima, M. C. A. *Química Nova*. 2008. 31, 614 – 622.

Luiz J. A. de S. *Novos Derivados Imidazolidínicos-2,4-diona e -2-tioxo-4-ona: estudos químico, biológico e termoanalítico*. 2007.