

52. **Dissertação:** “N,N’-difetil-benzamidinas: Síntese, Correlações de Hammett e Atividade Biológica”.

Autor(a): Lúcia Helena Souza dos Santos

Orientador(a): Profa. Aurea Echevarria Neves Lima

Data da Defesa :12/08/93

Resumo: A síntese das amidinas tem mostrado interesse especial, principalmente por apresentarem atividade biológica útil muito variada. Considerando-se que as N,N’-difetil-p-x-benzamidinas não serem conhecidas na literatura, sintetizamos uma série de novos compostos. Essas amidinas foram caracterizadas por espectroscopia de infravermelho, RMN ^1H e ^{13}C e espectrometria de massas. Foram determinados os valores dos $\text{pK}_{\text{a(s)}}$ para benzamidinas com X = H, OCH_3 , CH_3 , Br e Cl. As relações lineares de energia livre foram estudadas considerando-se as principais absorções do infravermelho e os deslocamentos químicos de RMN ^{13}C para as anilidas precursoras das amidinas e também para as próprias amidinas, incluindo os $\text{pK}_{\text{a(s)}}$ contra as constantes dos substituintes (σ), os parâmetros duais (σ_1 e σ_R) e as constantes de Swain e Lupton (F e R). Não foram observadas boas correlações para as anilidas. No caso das amidinas observaram-se boas correlações indicando o efeito indutivo como sendo mais significativo, evidenciando uma não coplanaridade entre os anéis aromáticos e o grupo amidínico. Os ensaios de atividade biológica mostraram resultados bastantes interessantes. Das amidinas ensaiadas a cloro-substituída apresentou atividade anti-humoral *in vivo* contra o sarcoma 180 e atividade anti-viral contra o vírus HIV. Os ensaios de toxicidade apresentaram que, apenas a amidina metoxi-substituída causava efeitos tóxicos graves quando administrada em doses elevadas.