

79. **Dissertação:** "Mesoiónicos 1,3,4-Tiadiazólio-2-Aminidas: Síntese, Solvatocromismo e Citotoxicidade"

Autor (a): Edson Fernandes da Silva

Orientador (a): Profa. Aurea Echevarria Aznar Neves Lima

Data da Defesa: 12/01/98

Resumo: Os compostos mesoiônicos são heterocíclicos com estrutura dipolar. Esses compostos tem apresentado bastante interesse devido à sua diversificada atividade biológica, e também devido a sua utilização como novos materiais e corantes, entre outras. Sintetizamos 4 novos mesoiônicos da classe 1,3,4-tiadiazólio-2-aminida, contendo um grupamento cinamóila p-substituído, e 7 cloridratos precursores desta mesma classe. A metodologia utilizada envolveu a reação de acilação anidra tiossemicarbazidas na presença de cloretos de ácido cinamoil-substituídos e posterior tratamento com base. Esses compostos foram caracterizados por técnicas espectroscópicas, principalmente RMN de ^1H e ^{13}C e ultra-violeta. Foram determinados, através de método espectrofotométrico os valores de pKa (s) dos cloridratos dos mesoiônicos, indicando natureza moderadamente ácida, apresentando correlação significativa com os parâmetros duais dos substituintes, OR . As propriedades solvatocrômicas dos compostos sintetizados foram investigadas e, estabeleceu-se novas escalas empíricas de polaridade utilizando a variação da energia de transição entre o estado fundamental e excitado na região do ultra-violeta. As escalas ET (BLD) e ET (MIH) foram correlacionadas com outras escalas empíricas de polaridade, apresentando melhores correlações para ET(30), ET(26), Z, S, XR, XB e Py. Ensaio de quimiosensibilidade frente a células do carcinoma de Ehrlich foram realizados, indicando significativa atividade citotóxica para os mesoiônicos e seus respectivos sais.