

100. **Dissertação:** "Síntese e caracterização estrutural de N,N'-diarilbenzamidinas com atividade leishmanicida".

**Autor (a):** Cláudio Eduardo Rodrigues dos Santos

**Orientador (a):** Profa. Áurea Echevarria Aznar Neves Lima

**Data da Defesa:** 28/05/2004

**Resumo:** Este trabalho relata a síntese de 10 derivados da classe das amidinas do tipo N,N'-diarilbenzamidinas nas formas de sais e neutras, através de duas diferentes rotas de obtenção. As duas rotas de síntese envolveram basicamente os mesmos reagentes sendo que uma delas foi realizada através de reações em meio sólido e a outra a refluxo. A caracterização das amidinas foi realizada por técnicas espectrométricas como IV, Massas, RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C. A utilização da técnica de NOEDIFF, além das outras técnicas espectroscópicas, juntamente com o auxílio de cálculos de modelagem molecular, permitiu identificar a presença da forma isomérica E e o tautômero amínico em relação ao grupo substituinte metoxila para o derivado N-(p-metóxi-fenil)-N'-fenilbenzamidina e, a mistura E e Z com a forma imínica em relação ao grupo nitro para o derivado N-(p-nitro-fenil)-N'-fenilbenzamidina. Foi realizada a determinação dos valores de pKa(s) utilizando o método potenciométrico para as amidinas sintetizadas, os valores obtidos, correlacionaram-se linearmente com os deslocamentos químicos dos carbonos amidínicos, indicando a transmissão dos efeitos eletrônicos sobre a basicidade. As novas amidinas obtidas foram submetidas a ensaios contra parasitas do gênero Leishmania, especificamente, L. amazonensis, brasiliensis e chagasi, indicando atividades bastante promissoras quando nas formas salinas. Os derivados dimetoxilados e o nitro-substituído apresentaram as melhores atividades anti-leishmania.