

21. **Tese:** "Mesoiónicos da Classe 1,3-Ditiólio-4-Tiolatos: Síntese, Reações de Cicloadição 1,3-Dipolar e Estudos do Efeito Hidrofóbico".

**Autor (a):** Paulo Afonso de Almeida

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

**Data da Defesa:** 12/03/2004

**Resumo:** Os compostos mesoiônicos despertam muito a atenção por serem heterocíclicos dipolares de estruturas não convencionais, apresentando uma atividade biológica muito diversificada e, também, por serem intermediários em reações de cicloadição, para a obtenção de novos derivados heterocíclicos. Neste trabalho foram sintetizados 17 novos derivados mesoiônicos, da classe dos 1,3-ditiólio-4-tiolatos, incluindo uma série homóloga de 13 derivados 2-N-morfolino-5-alkil-1,3-ditiólio-4-tiolatos. Os derivados 2-N-morfolino-5-etil-1,3-ditiólio-4-tiolatos e 2-N-morfolino-5-tetradecil-1,3-ditiólio-4-tiolatos foram submetidos a reações de cicloadição 1,3-dipolar frente a dipolarófilos usuais, como DMAD e ácido fenilpropílico, gerando 8 novos derivados tiofênicos. Todos os novos derivados mesoiônicos e tiofênicos foram devidamente caracterizados por pontos de fusão, técnicas espectroscópicas de IV, RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  (incluindo técnicas heteronucleares bidimensionais) e técnica espectrométrica de massas. A espectrofotometria de UV foi utilizada somente para os derivados mesoiônicos da série homóloga. Todos os derivados mesoiônicos foram submetidos a ensaios de toxicidade geral frente a *Artemia salina* Leach. Foi feito um estudo do efeito hidrofóbico dos derivados mesoiônicos da série homóloga 5-alkil substituídos, correlacionando-se a toxicidade geral frente a *Artemia salina* versus o número de carbonos da cadeia alquílica e também versus a hidrofobicidade na forma de logP.