

Simpósio de Integração Acadêmica

Inteligência Artificial: A Nova Fronteira da Ciência Brasileira
SIA UFV Virtual 2020



OBTENÇÃO DE NOVOS DERIVADOS HETEROCÍCLICOS DO FULERENO C₆₀: PLANEJAMENTO E INÍCIO DA ROTA DE SÍNTESE.

Guilherme M. Fernandes¹, Leandro José dos Santos², André Siqueira Montijo³, Letícia Carla Silveira Souza³, Vívian Helene Diniz Araújo⁴

1 - Graduando do Curso Química Licenciatura e bolsista PIBIC-CNPq, UFV - Campus Florestal; 2 - Professor Associado do Curso Química Licenciatura, UFV - Campus Florestal; 3 - Graduando(a) do Curso Química Licenciatura e bolsistas voluntários de Iniciação Científica, UFV - Campus Florestal; 4 - Doutoranda em Química do PPGMQ-MG, UFV - Campus Florestal.

E-mail: 1 - guilherme.m.Fernandes@ufv.br ; 2 - leandroj.santos@ufv.br; 3 - andre.montijo@ufv.br; leticia.carla@ufv.br; 4 - vivi6022@gmail.com.

Palavras-chave: fulereno-C₆₀; síntese; fuleropirrolidinas

Área de conhecimento e área temática: Ciências Exatas e Tecnológicas - Química Orgânica

Categoria do Trabalho: Pesquisa

Introdução

O fulereno-C₆₀ apresenta diversas propriedades, dentre elas, propriedades fotofísicas e fotodinâmicas. Pode-se utilizar estas propriedades em aplicações biológicas, como por exemplo, em terapia fotodinâmica (TFD) no tratamento de tumores superficiais.^{1,2} Isso porque, o C₆₀ pode absorver luz de comprimento de onda adequado, passando para um estado excitado, e na presença de O₂ formar espécies reativas de oxigênio (EROs), que são altamente citotóxicas. Entretanto, a baixa solubilidade do C₆₀ em solventes usuais, é uma limitação para o estudo de suas propriedades.^{1,2} A alternativa que vem sendo utilizada é a modificação química da estrutura do C₆₀, para se obter derivados solúveis em uma variedade de solventes.

Objetivos

Sintetizar novos derivados de C₆₀ solúveis em solventes usuais, permitindo assim o estudo de suas propriedades fotofísicas.

Metodologia

Para a obtenção dos derivados fulerênicos foi proposta uma rota de síntese a partir do 1,12-dodecanodiol (**1**), figura 1.

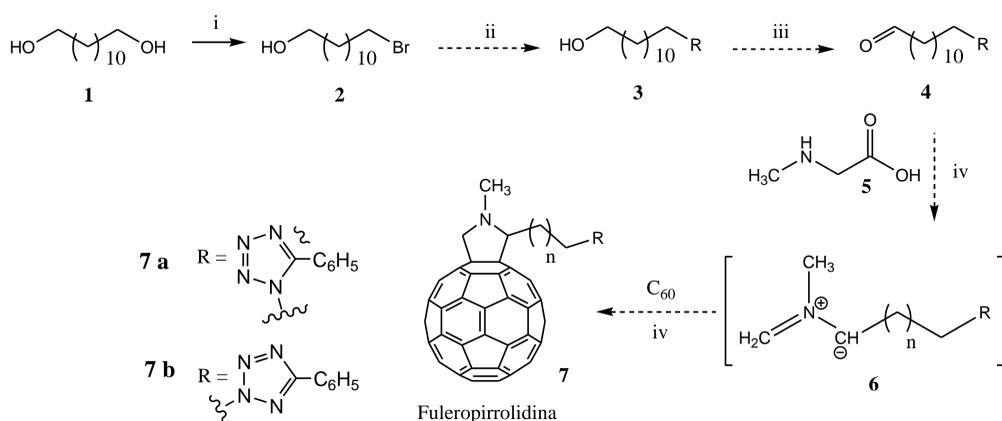


Figura 1: Rota de síntese proposta.

Apoio Financeiro

FAPEMIG e ao Programa Institucional de Bolsa de Iniciação Científica - (PIBIC-CNPq).

Resultados e Discussão



Na primeira etapa da síntese, foi realizada a reação entre 1,12-dodecanodiol (**1**), ácido bromídrico 48 % e tolueno. A reação permaneceu sob agitação magnética e refluxo, em um sistema Dean Stark, por 24 h, figura 2. Após elaboração, o produto foi purificado por cromatografia em coluna, utilizando-se como solvente um gradiente de hexano e o acetato de etila. Ao final, o 12-bromo-dodecan-1-ol (**2**) foi obtido com um rendimento de 44 %. O produto foi analisado por espectroscopia na região do infravermelho (IV).

Figura 2: Montagem do sistema.

No espectro de IV do produto **2**, figura 3, foram observadas bandas características em 3323,2 cm⁻¹ (estiramento O-H), em 2922,1 e 2853,2 cm⁻¹ (estiramento C-H) e 719,3 cm⁻¹ (estiramento C-Br), sugerindo a formação do produto. As demais etapas da rota serão realizadas posteriormente.

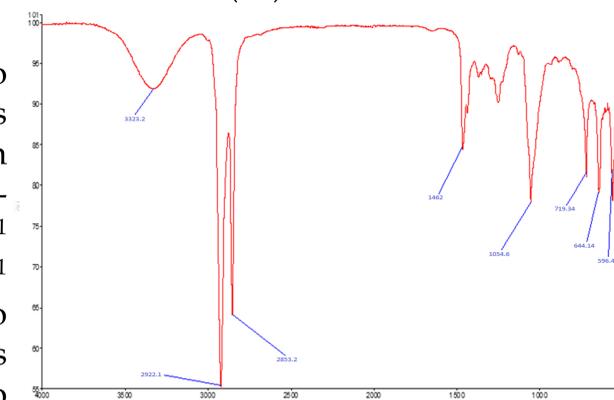


Figura 3: IV do produto monobromado **2**.

Conclusões

Ao final da rota de síntese, serão obtidas duas novas fuleropyrrolidinas (**7a** e **7b**), contendo os anéis tetrazólicos, que serão encaminhadas para avaliação de suas propriedades fotofísicas na produção de EROs.

Bibliografia

- 1 - Santos, L. J. e colaboradores, *J. Photochem. Photobiol. A*, 200 277-281, 2008.
- 2 - Araújo, V.H.D. Relatório final PIBIC-CNPQ, UFV-Florestal, 2015.

Agradecimentos

As agências financiadoras pelo incentivo à pesquisa e à UFV.