



## **O uso de solventes ambientalmente adequados em dois diferentes sistemas oxidantes para selenilação de núcleos naftólicos**

**Mylena Mendes Gularte\***, discente de Farmácia, Universidade Federal do Pampa, Campus Uruguaiana;

**Juliano Braun de Azeredo**, docente de Farmácia, Universidade Federal do Pampa, Campus Uruguaiana.

[Mylenagularte.aluno@unipampa.edu.br](mailto:Mylenagularte.aluno@unipampa.edu.br)

### **RESUMO:**

Neste trabalho, foi desenvolvido um estudo à cerca da utilização dos solventes verdes, ou seja, solventes ambientalmente adequados em duas diferentes metodologias de selenilação para núcleos naftólicos. Unir um selênio ao núcleo naftólico torna maior a possibilidade de realizar a síntese de moléculas orgânicas com potencial biológico. Isso porque, tanto o selênio, quanto o núcleo naftólico demonstram características biológicas isoladamente, como antioxidantes, antifúngicas, anti-HIV, anti-inflamatórias, dentre outras. Na química, as reações descritas que abordam a união de ambos são majoritariamente reações de substituição eletrofílica aromática. Habitualmente são adicionados aditivos e oxidantes ao meio reacional de maneira a facilitar o acontecimento da interação entre reagentes e formação do produto. Com isso, foi trabalhado em cima do uso de dois diferentes sistemas oxidantes, um já descrito na literatura contendo DMSO e outro com Peróxido de Hidrogênio e Uréia (UHP), proposto no presente trabalho. Assim foi possível comparar o desempenho de ambos sistemas catalíticos oxidantes com o uso de solventes verdes. O uso de solventes verdes, é importante pois pode acarretar em benefícios como baixa toxicidade, não-inflamabilidade, reciclabilidade, não corrosibilidade, subprodutos de geração de energia, além de evitar os problemas relacionados ao uso de solventes tóxicos. Portanto, foi desenvolvido no respectivo trabalho, a selenilação de núcleos naftólicos, aplicando solventes verdes ao meio e originando um leque de oportunidades para sínteses posteriores. Um dos principais objetivos do trabalho é verificar a desenvoltura dos solventes verdes em dois diferentes meios oxidantes, utilizando 2-naftol ou 2-metoxinaftaleno, juntamente com disseleneto de difenila como materiais de partida. A metodologia empregada foi dividida em procedimento experimental 1 e procedimento experimental 2, diferenciando-as o uso dos diferentes oxidantes. A metodologia 1 abordou o uso de 0,5 mmol de 2-naftol ou 2-metoxinaftaleno com 0,25 mmol de disseleneto de difenila utilizando o solvente verde lactato de etila (1mL). Além disso, foi inserido 20 mol% de iodo elementar e 1,5 equivalentes de DMSO o oxidante, por 4 horas a 80°C. Enquanto a segunda metodologia abordou o uso de 0,5 mmol de 2-naftol ou 2-metoxinaftaleno com 0,25 mmol de disseleneto de difenila, 0,5 mmol de oxidante UHP, 20 mol% de iodo elementar e 1 mL do solvente verde d-limoneno. A análise da formação de produtos foi acompanhada por placa de cromatografia em camada delgada. Após a formação de produtos ambas metodologias se portam de maneira equivalentes, passando pelo processo de extração para separar a fase orgânica da fase aquosa, bem

como a purificação por cromatografia em coluna, retirada de solventes e cálculos de rendimentos. Sobre a discussão de resultados, as reações se portaram da seguinte maneira para o procedimento experimental 1: A reação contendo 2-naftol com disseleneto de difenila, DMSO, iodo molecular e lactato de etila forneceu um rendimento de 45%. Já a reação nessas mesmas condições, substituindo 2-naftol por 2-metoxinaftaleno demonstrou a formação de apenas traços do produto. No procedimento experimental 2: A reação contendo 2-naftol com disseleneto de difenila, UHP, e iodo molecular com d-limoneno aumentou a formação para 68% do produto desejado. Enquanto essa mesma reação substituída por 2-metoxinaftaleno como fonte de naftol, apresentou uma formação de 45% nessas condições. Como considerações finais, pode-se concluir que a metodologia utilizando procedimento experimental 1 onde emprega-se o sistema oxidante já descrito ofertou rendimentos para 2-naftol intermediários enquanto para 2-metoxinaftaleno a mesma não foi eficiente formando apenas traços do produto. O procedimento experimental 2, por sua vez, se demonstrou eficiente para as duas reações, tanto a com 2-naftol que forneceu 68% do produto, quanto a do 2-metoxinaftaleno a qual forneceu 45% do rendimento. Portanto, o sistema oxidante teste proposto no trabalho se demonstrou competente para esse tipo de reação. Ainda, solventes verdes como d-limoneno e lactato de etila foram eficazes para o processo. O uso desses solventes é primordial visto que, ambos são derivados da biomassa, sendo o primeiro derivado de cascas de frutas cítricas e o segundo da fermentação do ácido láctico. Com isso, foi possível estabelecer um novo sistema oxidante para metodologia de selenilação de núcleos naftólicos.

**Agradecimentos:** Agradeço a Unipampa e ao CNPq pela bolsa concedida com vigência de agosto de 2020 a agosto de 2021.

**Palavras-chave:** Selênio, núcleo naftólico, selenilação, solventes verdes, oxidantes.