



## **APLICAÇÃO DO SOLVENTE BIODISPONÍVEL CIRENO NA SÍNTESE AMBIENTALMENTE ADEQUADA DE CALCOGENOL-ÉSTERES**

Mariana Dorneles Façanha, discente de farmácia, Universidade Federal do Pampa, Campus Uruguiana

Juliano Braun de Azeredo, docente, Universidade Federal do Pampa

marianafacanha.aluno@unipampa.edu.br

A síntese orgânica de compostos contendo calcogênios (enxofre, selênio e telúrio) em suas estruturas, vem sendo cada vez mais exploradas no âmbito acadêmico. Isso se deve, as promissoras atividades biológicas que esses compostos já comprovaram expressar. Entre elas principalmente, a ação antioxidante, que foi atestado quando descoberto de que o sítio ativo da enzima Glutathione Peroxidase (GPx) é o átomo de selênio presente na estrutura. Além disso, atividades antidepressivas, anti-inflamatória, antirretroviral, antinociceptiva, anticâncer, entre outras, também são atribuídas a esses compostos. Nesse contexto, é desejável encontrar reações eficientes para a formação da ligação carbono-selênio e que possam ser aplicados em escala industrial, gerando essas moléculas com grande potencial terapêutico. A respeito da aplicação em escala industrial, é de suma importância adotar fundamentos sustentáveis e buscar por metodologias ambientalmente amigáveis, uma vez que são gerados muitos resíduos que, por consequência, impacta na saúde do ser humano e do meio ambiente. Dessa forma, foram determinados alguns princípios que devem ser levados em consideração ao se realizar um processo químico em uma indústria, como processos químicos econômicos em energia, utilização de substâncias verdes. Diante disso, é sabido que a aplicação desses conceitos na síntese orgânica de calcogênios é um desafio, e também, que a utilização de solventes considerados sustentáveis nessas transformações se faz necessária. Dentre esses solventes, foi escolhido como alvo de nosso trabalho um subproduto da geração de energia através da biomassa, o cireno (di-hidrolevoglucosenona). Essa é uma molécula quiral, bio-disponível e sua utilização como solvente em síntese é extremamente relevante visto que, é uma aplicação para uma substância que seria um resíduo no meio ambiente. Dessa maneira, é possível substituir os solventes tóxicos, que são geralmente usados em síntese orgânica, por ter características de baixas toxicidade, volatilidade e inflamabilidade, além de solubilidade em água. Então, com o objetivo de formar ligações carbono calcogênios, o trabalho visa utilizar o cireno como solvente verde em reações de catálise heterogênea para a síntese de calcogeno-ésteres. Para o seguimento do projeto, obviamente, foram utilizados o cireno (1mL), além disso reagentes disponíveis comercialmente como o cloreto de p-toluíla (0,5 mmol), como agentes calcogenilantes o tiofenol (PhSH) (0,5 mmol), dissulfeto de difenila (PhS)<sub>2</sub> (0,25mmol) ou disseleneto de difenila (PhSe)<sub>2</sub> (0,25 mmol). Utilizou-se ainda o óxido de cobre (II) nanoparticulado (CuO) (10 mol%) como catalisador e carbonato de céσιο (Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) como aditivo. As reações ocorreram a uma temperatura média de 80° C. As reações foram acompanhadas por cromatografia em camada delgada e purificadas através de cromatografia em coluna. Das variações realizadas, o teste com disseleneto de difenila forneceu o produto desejado com 45% de rendimento e de forma semelhante, o produto foi obtido com 42% de rendimento quando utilizado o dissulfeto de difenila. Ademais, foi usado tiofenol em substituição ao dissulfeto e simultaneamente, testou-se a quantidade de carbonato de céσιο, obtendo o rendimento de 68% do tio-éster quando usou 1 mmol do aditivo, enquanto com 0,5 mmol o rendimento foi de 40%. À luz dessas considerações, conclui-se então, que foi possível a realização da ligação carbono calcogênio com rendimentos considerados moderados. Além disso, é uma metodologia que buscou e aplicou bem os conceitos ambientalmente amigáveis, principalmente devido ao cireno ser produto da queima de biomassa, que é a 3° maior fonte de energia brasileira principalmente a queima de cana-de-açúcar, mas também pode ser gerada a partir da casca de arroz, serragem, celulose, capim elefante e palha do milho.

**Agradecimentos:** UNIPAMPA.

**Palavras-chave:** Cireno; calcogênios; química verde.