SÍNTESE DE COMPOSTOS 1,2,3 TRIAZÓLICOS DERIVADOS DE CARBOIDRATOS

Paulo Lima [1]

Paulo Mazuque [2]

Gabriele Züge [3]

Maria Eduarda Martins de Matos [4]

Jaqueline Pinto Vargas [5]

Resumo:

O trabalho em questão visa sintetizar compostos 1,2,3 triazólicos derivados dos carboidratos: D-galactose e D-xilose para a remoção de metais (Cu(II), Fe(III), Pb(IV)) em águas contaminadas a partir da complexação dos compostos triazólicos e o centro metálico. E na produção de novos materias de grafeno oxidado contendo os compostos 1,2,3 triazólicos derivados de carboidratos. A metodologia de síntese do composto 1,2,3-triazólico derivado da D-galactose se inicia com a proteção dos grupos de hidroxila das posições 1,2,3 e 4 da D-galactose, utilizando acetona e iodo catalítico por 24 horas à temperatura ambiente, o produto obtido terá a hidroxila da posição 6 livre para a reação seguinte. O passo seguinte se consiste na mudança do grupo hidroxila livre em um grupo com um maior caráter de grupo abandonador. Assim, segue-se a rota sintética pela reação da D-galactose protegida com cloreto de p-toluenossulfonila, sob condições de uma mistura de dicloro metano piridina e agitação à temperatura ambiente por 24 horas, obtém-se assim, o tosilato da galactose protegida. Na reação seguinte, o grupo tosila é substituido por um grupo azida por meio da reação do tosilato da galactose e azida de sódio dissolvidos em dimetilformamida sob agitação e temperatura de refluxo por 48 horas, obtendo-se a azida da galactose. Por fim, a reação click para a obtenção do composto 1,2,3-triazólico derivado da galactose é obtido pela reação da azida da galactose e fenilacetileno sob condições brandas de um meio bifásico de diclorometano e água, ácido ascórbico e sulfato de cobre como catalisador. Os resultados estão sob investigação, pois estamos na fase de final da rota sintética para a obtenção do composto 1,2,3-triazólico derivado da galactose. Até o momento da escrita desse documento, o trabalho encontra-se na reação click. Assim que o composto 1,2,3-triazólico for obtido, serão realizados os estudos para a remoção dos metais Cu(II), Fe(III), Pb(IV) em águas contaminadas a partir da complexação do composto triazólico e os centros metálicos. Podemos concluir que este trabalho possui a sua importância sintética para o desenvolvimento da pesquisa em química na Unipampa e também pelo caráter tecnológico para a despoluição de águas contaminadas por metais.

Palavras-chave: Síntese, Reações Click, Carboidratos, 1,2,3-triazol.

Modalidade de Participação: Iniciação Científica

SÍNTESE DE COMPOSTOS 1,2,3 TRIAZÓLICOS DERIVADOS DE CARBOIDRATOS

[1] Aluno de graduação. paulo.mazuque@gmail.com. Autor principal

[2] Aluno de graduação. paulo.mazuque@gmail.com. Apresentador

[3] Aluno de graduação. gabrielezg75@gmail.com. Co-autor

[4] Aluna de gradução. mmartinsduda@gmail.com. Co-autor

[5] Docente. jaquelinevargas@unipampa.edu.br. Orientador

SÍNTESE DE COMPOSTOS 1,2,3 TRIAZÓLICOS DERIVADOS DE CARBOIDRATOS

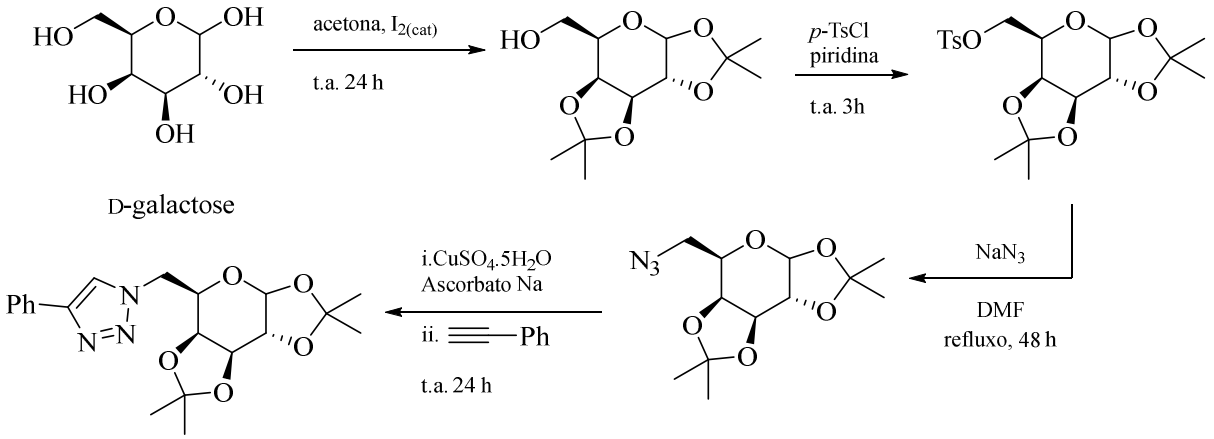
INTRODUÇÃO

A partir dos anos 90, as pesquisas científicas voltaram-se para o desenvolvimento de práticas ambientalmente sustentáveis, de maneira que o desenvolvimento tecnológico seja menos agressivo para o meio ambiente. (ANASTAS, 2009) A partir de então, houve um desenvolvimento expressivo na área de Química, chamada de *Química Verde*, cujo objetivo é tornar o seu desenvolvimento *mais verde*. A química verde está centrada em 12 princípios, os quais incluem-se o uso de fontes renováveis de matéria prima e a catálise. (ANASTAS, 2009) Sendo assim, o presente trabalho visa a utilização de fontes renováveis, como os carboidratos, para sintetizar compostos 1,2,3 triazólicos derivados da D-galactose e D-xilose, por meio de uma reação catalítca. Os compostos obtidos serão utilizados para a remoção de metais (Cu(II), Fe(III), Pb(IV)) em águas contaminadas a partir da complexação dos compostos triazólicos e o centro metálico.

METODOLOGIA

A metodologia de síntese (AFFELDT, 2012; BRAGA, 2010; MORO, 2013; TRIPATHI, 2008; VARGAS, 2015; WANG, 2005) do composto 1,2,3-triazólico derivado da D-galactose se inicia com a proteção dos grupos de hidroxila das posições 1,2,3 e 4 da D-galactose, utilizando acetona e iodo catalítico por 24 horas à temperatura ambiente, o produto obtido terá a hidroxila da posição 6 livre para a reação seguinte. O passo seguinte se consiste na mudança do grupo hidroxila livre em um grupo com um maior caráter de grupo abandonador. Assim, segue-se a rota sintética pela reação da D-galactose protegida com cloreto de *p*-toluenossulfonila, sob condições de uma mistura de dicloro metano piridina e agitação à temperatura ambiente por 24 horas, obtém-se assim, o tosilato da galactose protegida. Na reação seguinte, o grupo tosila é substituido por um grupo azida por meio da reação do tosilato da galactose e azida de sódio dissolvidos em dimetilformamida sob agitação e temperatura de refluxo por 48 horas, obtendo-se a azida da galactose. Por fim, a reação *click* para a obtenção do composto 1,2,3-triazólico derivado da galactose é obtido pela reação da azida da galactose e fenilacetileno sob condições brandas de um meio bifásico de diclorometano e água, ácido ascórbico e sulfato de cobre como catalisador (Figura 1).

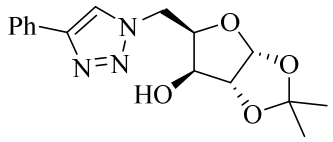
Figura 1- Síntese de ligante galactopiranosídeo 1,2,3-triazólico



Fonte: Autor, 2018.

Devido aos baixos custos dos monossacarídeos, comparados aos custos dos derivados acetilênicos, pretende-se sintetizar o outro ligante 1,2,3-triazólico derivado da D-xilose (Figura 2).

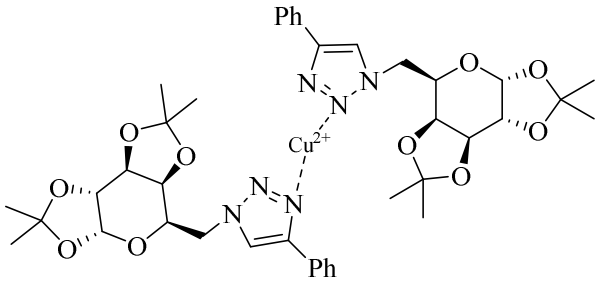
Figura 2- Exemplo de ligante carboidrato 1,2,3-triazólico derivado da D-xilose.



Fonte: Autor, 2018.

As reações de complexação serão realizadas utilizando sais de cobre(II), ferro(III) e chumbo(IV) (LIU, 2013) sob diferentes faixas de pH. Serão investigados meios levemente ácidos (pH 5 – 7) ou levemente básicos (pH 7 – 9) para a formação dos complexos. Pretende-se avaliar a influência do pH do meio para a formação dos complexos. Na figura 3, temos um exemplo de complexo esperado por meio da reação entre dois ligantes carboidrato 1,2,3-triazólico derivado da D-galactose e o centro metálico de cobre(II), o equilíbrio da carga positiva do íon metálico ocorrera pela presença dos ânions contidos no meio reacional.

Figura 3– Exemplo de complexo esperado entre dois ligantes carboidrato 1,2,3-triazólico derivado da D-galactose e o centro metálico de cobre(II).



Fonte: Autor, 2018. (Ref. LIU, 2013)

A análise dos compostos será determinada primeiramente por cromatografia em camada delgada (CCD) durante o desenvolvimento das reações. Serão realizadas também a espectroscopia de infravermelho e, se possível, análises de ressonância magnética nuclear (RMN) de ^{1}H e de ^{13}C através da colaboração de grupos de pesquisa parceiros como o do prof. Diogo Lüdtke (UFRGS) e do prof. Davi Back (UFSM).

RESULTADOS e DISCUSSÃO

Os resultados estão sob investigação, pois estamos na fase de final da rota sintética para a obtenção do composto 1,2,3-triazólico derivado da galactose. Até o momento da escrita desse documento, o trabalho encontra-se na reação *click*. Assim que o composto 1,2,3-triazólico for obtido, serão realizados os estudos para a remoção dos metais Cu(II), Fe(III), Pb(IV) em águas contaminadas a partir da complexação do composto triazólico e os centros metálicos.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Podemos concluir que este trabalho possui a sua importância sintética para o desenvolvimento da pesquisa em química na Unipampa e também pelo caráter tecnológico para a despoluição de águas contaminadas por metais.

A perspectiva futura é a união dessa metodologia apresentada neste trabalho com o desenvolvimento de novos materiais envolvendo nanoestruturas de carbono, como o grafeno. Há uma forte iniciativa de colaboração com a prof. Carolina Matos, pertencente ao campus Caçapava do Sul, a qual desenvolve sua pesquisa no campo de óxido de grafeno.

REFERÊNCIAS

AFFELDT, R. F. et al. Synthesis of selenium-linked neoglycoconjugates and pseudodisaccharides. **Tetrahedron**, v. 68, p. 10470-10475, 2012.

ANASTAS P.; EGHBALI N. Green Chemistry: Principles and Practice. **The Royal Society of Chemistry**, v. 39, p. 301–312, 2009.

BEACH, E. S.; CUI Z.; ANASTAS P. T. et al. Green Chemistry: A design framework for sustainability. **The Royal Society of Chemistry**, v. 2, p. 1038–1049, 2009.

BRAGA, H. C. et al. Synthesis of 5'-seleno-xylofuranosides. **Tetrahedron**,v. 66, p. 3441-3446, 2010.

BRAGA, H. C. et al. Synthesis of seleno-carbohydrates derived from D-galactose. **Carbohydrate Research**, v. 16, p. 2328-2333, 2010.

CHITTABOINA S.; XIE F.; WANG Q. One-pot synthesis of triazole-linked glycoconjugates. **Tetrahedron Letters**, **v. 46**, p. 2331-2336, 2005.

MORO, A. V. et al. Synthesis and photophysical properties of fluorescent 2,1,3-benzothiadiazole-triazole-linked glycoconjugates: selective chemosensors for Ni(II). **Tetrahedron**, v. 69, p. 201-206, 2013.

NELSON, D. L.; COX, M. M. **Lehninger - Princípios de Bioquímica.** 3ª ed. São Paulo, Sarvier, 2002.

RATHINAM B., CHIEN C., CHEN B., LIU J. Fluorogenic and chromogenic detection of Cu^{+2} and Fe^{+3} species in aqueous media by rhodamineetriazole conjugate. **Tetrahedron**, **v. 69,** p. 235-241, 2012.

SINGH B. K.; YADAV A. K.; KUMAR B.; GAIKWAD A.; SINHA S. K.; CHATURVEDI V.; TRIPATHI R. P. Preparation and reactions of sugar azides with alkynes: synthesis of sugar triazoles as antitubercular agents. **Carbohydrate Research**, **v. 343**, p. 1153-1162, 2008.

VARGAS, J. P. et al. Synthesis of alkylseleno-carbohydrates and evaluation of their antioxidant properties. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 26, p. 810-815, 2015.