

Síntese de esteróides deuterados a partir do colesterol com potencial utilização como biomarcadores de petróleo.

Claudio C. Lopes (PQ)^{1*}, Rosangela S. C. Lopes (PQ)¹, Jarí N. Cardoso (PQ)¹, Maicon G. de Miranda (PG)¹, Gabriela F. Martins (IC)¹. claudiosabbatini@uol.com.br.

¹ UFRJ, Instituto de Química, CEP 21949-900, Rio de Janeiro – RJ.

Palavras Chave: biomarcadores, esteróides deuterados, síntese orgânica.

Introdução

Os biomarcadores estão ligados a origens geoquímicas específicas, em função das suas estruturas moleculares, estas substâncias relacionam-se estruturalmente a fontes biológicas bem definidas. A identificação individual de cada composto presente em óleos e sedimentos pode ser uma tarefa difícil e tediosa, pois existem inúmeros compostos nestas matrizes. A adição de um padrão interno pode tornar esta tarefa mais fácil. O padrão interno é um composto conhecido, o qual é previamente adicionado a uma amostra a ser analisada e deve ser ao mesmo tempo separável do analito por CG-EM. Os cálculos dos parâmetros geoquímicos obtidos a partir do espectro de massas são dependentes dos métodos empregados. Os valores desses parâmetros podem variar muito dependendo da técnica empregada. Por isso, a introdução de padrões internos se faz necessária para uma análise quantitativa. Uma boa abordagem para este problema é a utilização de compostos deuterados, os quais seriam idênticos a substância que se deseja identificar, exceto pela diferença em seu peso molecular, devido à substituição de alguns átomos hidrogênicos por seu isótopo estável (deutério)¹. Com relação ao acesso a estas substâncias é válido mencionar o seu alto custo comercial (100µg ~ U\$1700).

Os parâmetros de maturação baseados na distribuição dos esteranos são utilizados exaustivamente na geoquímica de petróleo.

Resultados e Discussão

Neste trabalho utilizamos como matéria-prima o colesterol (1), um esteróide natural abundante e de baixo custo comercial para prepararmos os colestanos deuterados (5) e (9) através de reações com alto rendimento global (Figura 1).

O maior ineditismo desta nova abordagem sintética são as condições mais exequíveis do ponto de vista experimental e de baixo custo realizadas para obtenção das cetonas tetra e heptadeuteradas, (4, 60%) e (8, 65%), utilizando um sistema reacional constituído de dioxana e hidróxido de sódio deuterado sob refluxo, comparativamente aos métodos descritos na literatura para a preparação de 4 usando MeOD/MeONa².

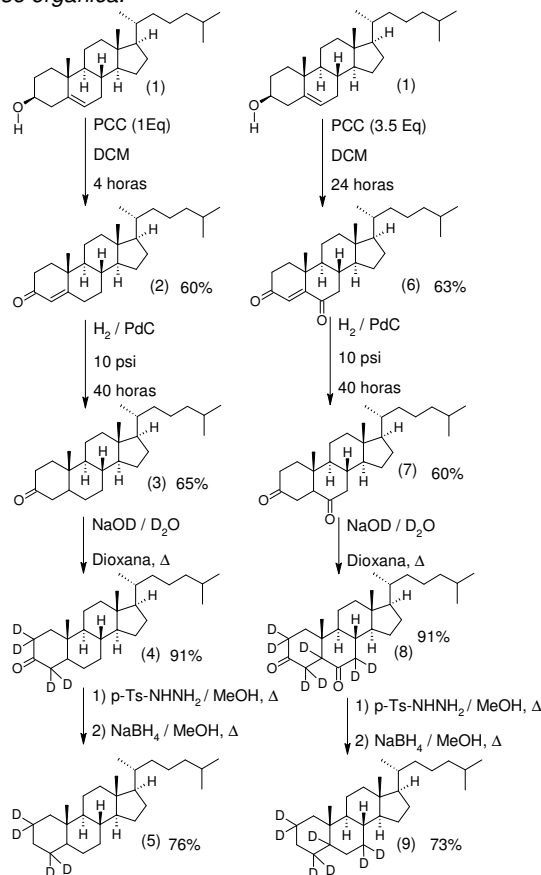


Figura 1. Síntese dos colestanos deuterados 5 e 9 a partir do colesterol

Conclusões

Concluimos que quanto mais prótons forem substituídos por átomos de deutério, melhor será a análise por CG-EM. Concluimos ainda, que a síntese de estruturas esteroidais deuteradas é um processo viável, e que pode ser realizado com um menor custo que os processos anteriormente descritos.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERJ, FIOCRUZ e CENPES-UFRJ.

¹ Peters, K. E.; Moldowan, J. M. The Biomarker Guide. **2005**, 3.

² Tokes, L. Journal of Organic Chemistry. **1972**, 37 (26), 4421-4429.