

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

Claudio C. Lopes (PQ)<sup>1\*</sup>, Rosangela S. C. Lopes (PQ)<sup>1</sup>, Jarí N. Cardoso (PQ)<sup>1</sup>, Maicon G. de Miranda (PG)<sup>1</sup>, Gabriela F. Martins (IC)<sup>1</sup>. [claudiosabbatini@uol.com.br](mailto:claudiosabbatini@uol.com.br).

<sup>1</sup> 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 hidrogênios por seu isótopo estável (deutério)<sup>1</sup>. Com relação ao acesso a estas substâncias é valido 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 preparamos os colestano 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/MeONa<sup>2</sup>.

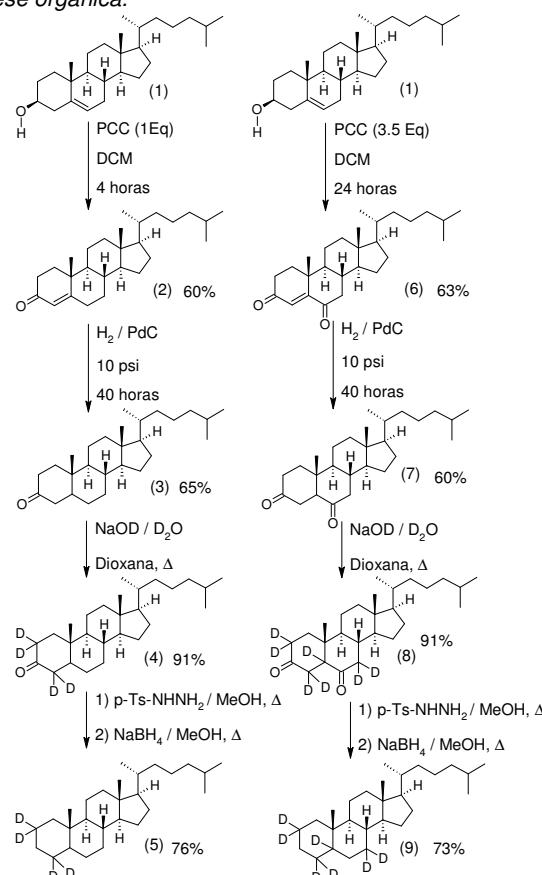


Figura 1. Síntese dos colestano deuterados 5 e 9 a partir do colesterol

### Conclusões

Concluímos que quanto mais prótons forem substituídos por átomos de deutério, melhor será a análise por CG-EM. Concluímos 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.

<sup>1</sup> Peters, K. E.; Moldowan, J. M. The Biomarker Guide. 2005, 3.

<sup>2</sup> Tokes, L. Journal of Organic Chemistry. 1972, 37 (26), 4421-4429.