

## Síntese de um iniciador tetrafuncional derivado de *myo*-inositol a ser empregado na preparação de polímeros estrela por ATRP.

Daniela M. Fernandes<sup>1\*</sup> (PQ), Vivian A. Tomaz<sup>1</sup> (IC), Marcos R. Maurício<sup>1</sup> (PG), Rafael Silva<sup>2</sup> (PG), Gisele F. Gauze<sup>1</sup> (PQ), Ivânia T.A. Schuquel<sup>1</sup> (PQ), Edvani C. Muniz<sup>1</sup> (PQ), Adley Forti Rubira<sup>1</sup> (PQ)  
\*danidqi@hotmail.com

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Maringá. Av. Colombo, 5790 CEP: 87020-900, Maringá, PR

<sup>2</sup> Department of Chemistry and Chemical Biology, Rutgers, The State University of New Jersey, 610 Taylor Road, Piscataway, NJ 08854.

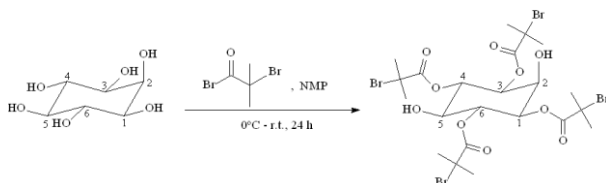
Palavras Chave: ATRP, iniciador tetrafuncional, polímero estrela.

### Introdução

Polímeros estrela são uma classe especial de polímeros ramificados cujas propriedades se diferenciam das de polímeros lineares de mesma massa molar. Estes polímeros podem ser obtidos por polimerização radicalar via transferência atômica (ATRP). Em solução, os polímeros estrela podem formar micelas, podendo ser empregados em sistemas de encapsulação e liberação controlada de fármacos. O estudo detalhado do comportamento destes polímeros em solução depende do conhecimento exato de sua estrutura e composição<sup>1</sup>. Desta forma, o objetivo do presente trabalho é a síntese de um iniciador tetrafuncional, com sítios funcionalizados bem definidos, a partir de *myo*-inositol e brometo de 2-bromoisobutiril, que possibilite a obtenção de polímeros estrela por ATRP.

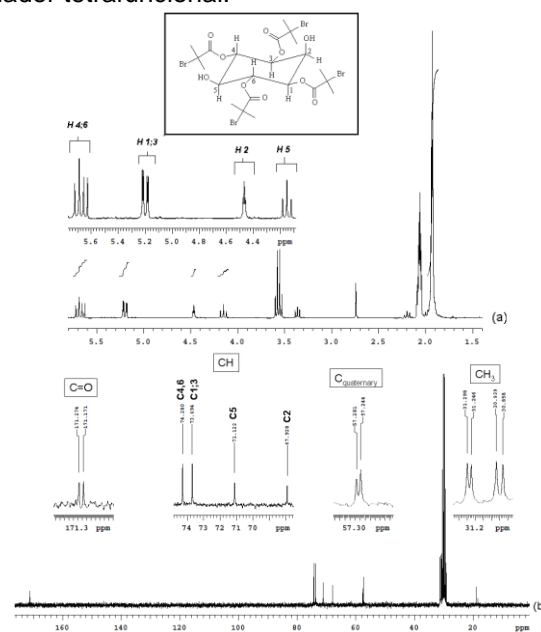
### Resultados e Discussão

A síntese do iniciador derivado de *myo*-inositol foi baseada no método de Matyjaszewski<sup>2</sup> (**Esquema 1**). Nesta síntese, *myo*-inositol (5,55 mmol) foi disperso em 20 mL de NMP e a mistura foi resfriada a 0 °C para a adição de brometo de 2-bromoisobutiril (55,5 mmol). A mistura foi mantida a temperatura ambiente e sob agitação magnética constante por 24 h e posteriormente, dissolvida em 30 mL de CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> e lavada sucessivamente com solução saturada de NaHCO<sub>3</sub> e água. A fase orgânica foi concentrada em vácuo e o resíduo foi re-dissolvido em clorofórmio e precipitado em hexano, obtendo-se um sólido branco. A estrutura do  $\alpha$ -bromoéster de *myo*-inositol foi confirmada a partir de dados espectrais de RMN <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C, mostrados na Figura 1.



**Esquema 1.** Síntese do iniciador tetrafuncional, 1,3,4,6-tetrakis(2-bromoisobutirato) de *myo*-inositol.

O espectro de RMN <sup>1</sup>H do iniciador (**Figura 1a**) exibe quatro sinais entre  $\delta$  5,7 e 4,1 referentes aos prótons do anel ciclohexanohexol. O sinal triplete em  $\delta$  5,69 pode ser atribuído aos prótons H-4/H-6 e o sinal em  $\delta$  5,20 a H-1/H-3. Outros dois tripletes em  $\delta$  4,47 e 4,15 são característicos dos prótons H-2 e H-5, respectivamente. O espectro de RMN <sup>13</sup>C (**Figura 1b**) apresenta quatro carbonos metílicos dos grupos 2-bromoisobutiril; quatro carbonos CH e quatro carbonos quaternários (incluindo dois carbonílicos em  $\delta_C$  171,3 e  $\delta_C$  171,2), confirmando a formação do iniciador tetrafuncional.



**Figura 1.** Espectros de RMN <sup>1</sup>H (a) e <sup>13</sup>C (b) do 1,3,4,6-tetrakis(2-bromoisobutirato) de *myo*-inositol, obtidos em acetona-d<sub>6</sub> (300 e 75,5 MHz).

### Conclusões

Foi sintetizado um iniciador tetrafuncional com sítios de iniciação bem definidos a partir de *myo*-inositol e brometo de 2-bromoisobutiril, com potencial para ser empregado na síntese de polímeros estrela a partir da técnica de ATRP.

### Agradecimentos

A UEM-DQI, CAPES-CNPq e à SBQ.

<sup>1</sup> Guo, Z.; Chen, X.; Zhang, X.; Xin, J.; Li, J.; Xiao, H. *Tetrahedron Letters*, **2010**, *51*, 2351

<sup>2</sup> Matyjaszewski, K.; Xia, J. *Chemical Reviews*, **2001**, *101*, 2921.