

# Síntese e caracterização de novos aminotetrazóis para estudo catalítico na degradação de compostos organofosforados.

Fernando Molin\* (PQ)<sup>1</sup>, Bruna Dutra (IC)<sup>1</sup>, Morgana C. Vicente (IC)<sup>1</sup>, Guilherme A. Justen (IC)<sup>1</sup>  
\*fmolin@utfpr.edu.br

<sup>1</sup> Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Departamento Acadêmico de Química e Biologia, Campus Curitiba, sede Ecoville, Curitiba, PR.

Palavras Chave: Tetrazol, Pesticidas, Organofosforados, Catalisadores.

## Abstract

Syntheses and characterization of news aminotetrazoles for studying in degradation of organophosphorus compounds. This work presents the synthesis and characterization of two news organic aminotetrazoles compounds for studies in organophosphorus degradation.

## Introdução

Além de seu emprego como pesticidas, compostos organofosforados (OPs) foram amplamente explorados como ingredientes chave em agentes da guerra química no mundo<sup>1</sup>. Assim, o uso indiscriminado desses compostos levou à contaminação dos ecossistemas terrestres e aquáticos ao longo do mundo como resultado de um excessivo e contínuo uso de pesticidas na agricultura, indústrias, e ambientes residenciais. Pesticidas organofosforados (organophosphorus - OPs) são compostos sintéticos, normalmente ésteres, amidas ou derivados tiólicos de ácido fosfórico, fosfônico, fosforotióico ou fosfonotióico, sendo ~38% do total de pesticidas utilizados<sup>2</sup>.

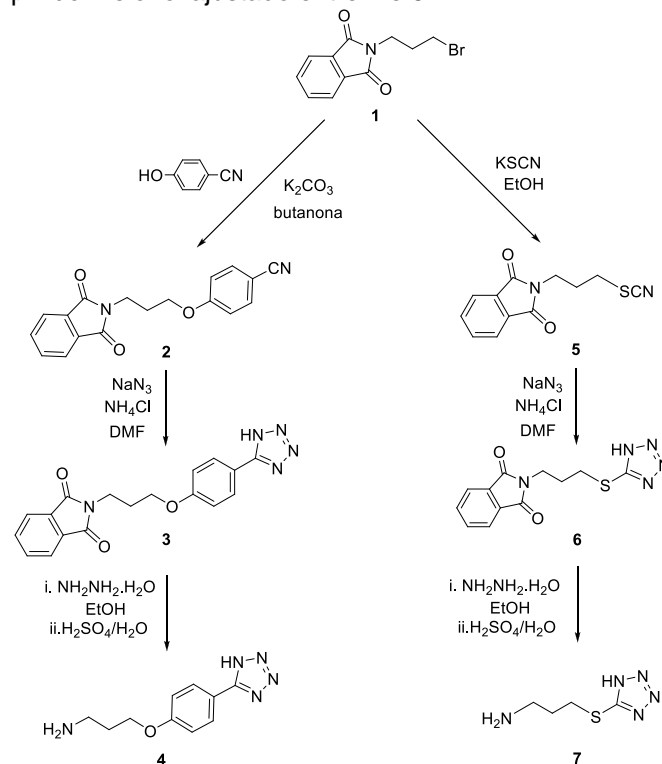
Eventos recentes vêm enfatizando a necessidade de novos métodos de detecção, descontaminação e destruição de OPs. No presente trabalho duas novas moléculas contendo a função aminotetrazol foram sintetizadas<sup>3</sup>. O grupo amino será ancorado à uma superfície polimérica multifuncional e a unidade tetrazol estará livre para atuar como nucleófilo em reações de desfosforilação e ter sua atividade catalítica avaliada, uma vez que o sistema pode agir como enzimas artificiais na degradação de organofosfatos.

## Resultados e Discussão

Os compostos finais foram preparados de acordo com o Esquema 1. Inicialmente a ftalimida foi alquilada com 1,3-dibromopropano obtendo-se o composto **1**, onde o bromo terminal foi substituído por 4-cianofenol ou tiocianato, fornecendo os compostos **2** e **5**, respectivamente.

As nitrilas foram então convertidas em seus respectivos tetrazóis usando azida de sódio e cloreto de amônio em DMF. Por fim foi realizada a hidrólise da ftalimida com hidrato de hidrazina em etanol, seguida pela adição de uma mistura de ácido sulfúrico e água 1:1.

Ao final da hidrólise o produto precipitou quando o pH do meio foi ajustado entre 4 e 5.



Esquema 1. Rota sintética dos aminotetrazóis **4** e **7**.

## Conclusões

Todos os compostos foram sintetizados e caracterizados através de espectroscopia de infravermelho, RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C. Os produtos finais estão sendo ancorados à um polímero natural para estudo catalítico na degradação de compostos organofosforados usando catálise heterogênea.

## Agradecimentos

- A Universidade Tecnológica Federal do Paraná;
- Universal/CNPq
- Ao Centro de RMN da Universidade Federal do Paraná;

<sup>1</sup> Orth, E.; *et al. Chemical Communications*, p. 6210–6213, **2015**.

<sup>2</sup> Yang, C.; *et al. Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v. 61, n. 6, p. 1328–1334, **2013**.

<sup>3</sup> Kavvalakis, M. P. *Forensic Science International*, v. 218, n. 1-3, p. 111–122, **2012**.