

## **SÍNTESE E CARCTERIZAÇÃO DE MONÔMEROS METACRÍLICOS E DESENVOLVIMENTO DE COMPLEXOS DE INCLUSÃO**

Paula Roberta Perondi Furtado<sup>1</sup>, Nataly Castro<sup>2</sup>, Rogério Aparecido Gariani<sup>3</sup>, Marcia Margarete Meier<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Acadêmica do Curso de Licenciatura em Química – UDESC/CCT – bolsista PROBIC/UDESC.

<sup>2</sup> Mestranda do Curso de Pós-Graduação em Química Aplicada – UDESC/CCT

<sup>3</sup> Pesquisador, Departamento de Química – UDESC/CCT

<sup>4</sup> Orientadora, Departamento de Química – UDESC/CCT – marcia.meier@udesc.br

Palavras-chave: 10-MDP, complexo de inclusão, monômero.

Atualmente, a restauração dentária é realizada empregando a tecnologia de adesivos dentais associada ao uso de compósitos, ambos contendo monômeros metacrílicos que são polimerizados *in situ* pelo cirurgião dentista.<sup>1</sup> Estes compósitos dentais assemelham-se esteticamente ao dente, tornando seu uso popular e acessível.<sup>2</sup>

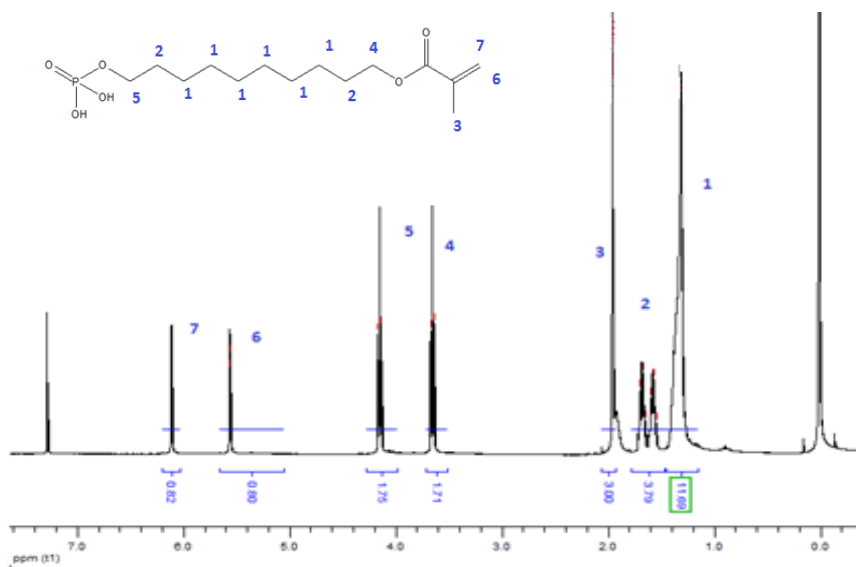
Um dos compostos que vem sendo utilizado amplamente é o monômero di-hidrogenofosfato de 10 metacriloxidecil (10-MDP), onde o grupamento de ácido fosfórico da estrutura do 10-MDP tem a capacidade de unir-se quimicamente à hidroxiapatita dental, atuando como um adesivo.<sup>1</sup> Porém, um problema encontrado na utilização deste monômero em misturas adesivas é sua instabilidade química.<sup>3</sup> Diante deste problema, este projeto tem como objetivo geral aumentar a estabilidade química do 10-MDP e também do monômero DMA (dodecanodiol dimetacrilado, resultante da primeira etapa de síntese) pela formação de complexos de inclusão utilizando-se a  $\beta$ -Ciclodextrina (BCD). As Ciclodextrinas são moléculas com estruturas espaciais diferenciadas de cavidades ocas, deixando-as capazes de encapsular no seu interior outras moléculas.<sup>4</sup> Sendo que um dos objetivos específicos é sintetizar 10-MDP.

Portanto, neste resumo descreve-se a síntese do 10-MDP baseando-se em trabalhos anteriores de Ogliari col. (2008). Na primeira etapa sintetizou-se o precursor 10-hidroxidecilmetacrilato, utilizando-se ácido metacrílico (10 mmol), 1,10-decanediol (15 mmol), ácido p-toluenossulfônico, 2,6-di-terc-butil-4-metilfenol, sulfato de cobre e ciclohexano como solvente. A reação foi realizada em um balão de fundo redondo ligado a um aparelho de Dean Stark, aquecido até a temperatura de refluxo. Esta primeira etapa da reação foi denominada esterificação de Fischer, onde um ácido carboxílico reage com um álcool para formar um éster.<sup>5</sup>

Em seguida este produto foi purificado em coluna cromatográfica, onde se separou o monômero dimetacrilato (DMA) do 10-hidroxidecilmetacrilato (10-HDMA). Após a purificação foi realizada a síntese da molécula alvo o di-hidrogenofosfato de 10-metacriloxidecil (10-MDP), utilizando-se um balão de fundo redondo num banho de gelo, onde neste adicionou-se acetona, pentóxido de fósforo e sob agitação constante adicionou-se lentamente, ao longo de 1 hora, 29 mmol do produto da primeira síntese, o 10-HDMA. Em seguida, o banho de gelo foi removido e a reação foi conduzida à temperatura ambiente durante 5 horas. Filtrou-se o produto, e adicionou-se 2,6-di-terc-butil-4-metilfenol, ao final obteve-se um rendimento de 83%.

Ambos os monômeros da primeira síntese (DMA e 10-HDMA) como da segunda síntese (10-MDP) foram caracterizados por Ressonância Magnética Nuclear de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C em CDCl<sub>3</sub>, o 10-MDP também por RMN<sup>31</sup>P, além de análises de FT-IR e QTOF-MS.

O espectro de FT-IR do 10-MDP apresentou bandas características de vP-O. No espectro de RMN<sup>1</sup>H (Figura 1) há sinais característicos de CH<sub>2</sub> ligados a grupos eletronegativos em 3,6 a 4,1 ppm; hidrogênio ligado a carbono vinílico na região de 5,5 a 6,1 ppm; hidrogênios metilênicos na região de 1,0 e 1,7 ppm e hidrogênio de grupo metílico próximo a 2,0 ppm. O espectro de RMN<sup>31</sup>P indicou o surgimento de dois sinais, sendo um muito mais intenso, indicando a presença de átomos de fósforo na estrutura. O procedimento utilizado para a síntese mostrou-se simples, eficaz e com um bom rendimento. A caracterização por RMN<sup>1</sup>H e <sup>31</sup>P, FT-IR e massa confirmou a estrutura química do 10-MDP.



**Fig.1** Espectro de RMN de <sup>1</sup>H do monômero 10-MDP

Após a síntese destes monômeros, realizaram estudos para o desenvolvimento de complexos de inclusão, onde inicialmente se encapsulou o DMA, no qual pelos espectros de RMN<sup>1</sup>H é perceptível o deslocamento de alguns sinais característicos de hidrônios internos da cavidade BCD, que comprovam a formação do complexo de inclusão. Estudos futuros serão realizados para encapsular o 10-MDP.

1. LANDUYTA, K. et al. *Systematic review of the chemical composition of contemporary dental adhesives*. Biomaterials. 2007; 28: 3757–3785.
2. FIGUEIREDO, M. *Adesão química: a incorporação do monômero 10-MDP nos adesivos dentários*. 2015. 21f. Monografia de Investigação/ Relatório de Atividade Clínica do Mestrado Integrado em Medicina Dentária – Faculdade de medicina dentaria – Universidade do Porto. Porto, 2015.
3. AIDA, M. et al. *Degradation-stage Effect of Self-etching Primer on Dentin Bond Durability*. Journal Dent Res. 2009; 88: 443-448.
4. CUNHA, M.; BARRETO, L. Utilização de ciclodextrinas na formação de complexos de inclusão de interesse farmacêutico. Revista de Ciências Farmacêuticas Básica e Aplicada. volume 28, número1, p.1-9, 2007.
5. BRUCE, P. Y.. *Química orgânica*, v. 2, p. 149 , 4ª ed. Pearson Prentice Hall: São Paulo, 2006.