Projeto de Dissertação: Síntese e Caracterização Estrutural de Novos Derivados da Epiandrosterona

Emanuel I. C. Parreira[1], Pedro Brandão[2,3,4], Carolina S. Marques[5]

[1]Estudante do Mestrado em Tecnologias Laboratoriais em Ciências Forenses, Egas Moniz School of Health and Science, Caparica, 2829-511, Portugal

[2]Egas Moniz Center for Interdisciplinary Research (CiiEM), Egas Moniz School of Health and Science, Caparica, 2829-511, Portugal

[3] iBB-Institute for Bioengineering and Biosciences, Department of Bioengineering, and Associate Laboratory i4HB–Institute for Health and Bio-Economy, Instituto Superior Técnico, University of Lisboa, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisbon, Portugal

[4] Centro de Química de Coimbra - Institute of Molecular Sciences (CQC-IMS), Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, University of Coimbra, 3004-535 Coimbra, Portugal

[5] Centro de Química Estrutural, Institute of Molecular Sciences (CQE-IMS), Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Lisbon, 1749-016, Portugal

Autor Correspondente: emanuel.c.parreira@gmail.com

Introdução

A administração de agentes farmacológicos ou estimulantes, cofigura uma pratica recorrente no contexto desportivo, sendo necessário a averiguar os seguites aspetos:



Potencial de melhoria de desempenho

Riscos ou efeitos adversos associados

Violação da Ética desportiva

Entre os agentes frequentemente utilizados destacam-se os **Esteroides Anabolizantes Androgénicos (EAA)**, derivados sitéticos da Testosterona. O potencial dos EAA na melhoria de rendimento, impulsionou a procura por estas substâncias [1, 2].

Problemática

CRESCIMENTO DO MERCADO ILÍCITO

O aumento da procura levou à expensão do comercio ilegal de EAA, principalmente à nível digital [2].

AUMENTO DO CONTROLO

O crescimento de mercado ilícito tornou necessárias medidas de controlo mais rigorosas por parte dos orgãos competentes [3].

ALTERAÇÕES ESTRUTURAIS

Devido às medidas de controlo impostas o mercado ilícito adaptou-se através da realização de alterações estruturais nos esteroides já conhecidos [3].

ESTEROIDES ANABOLIZANTES ANDROGÉNICOS DE NOVA GERAÇÃO

A deteção dos esteroides modificados torna-se mais difícil, exite imprevisibilidade da estabilidade química e toxicocinética das moléculas, tornado imprevísivel a toxicidade a que os utilizadores se expõem [4].

Objectivo

Síntese e caracterização estrutural de novos derivados da Epiandrosterona, com intuito de explorar o "chemical space" dos derivados da Epiandrosterona, gerando bibliotecas de caracterização que possam servir como suporte para a sua futura deteção analítica.

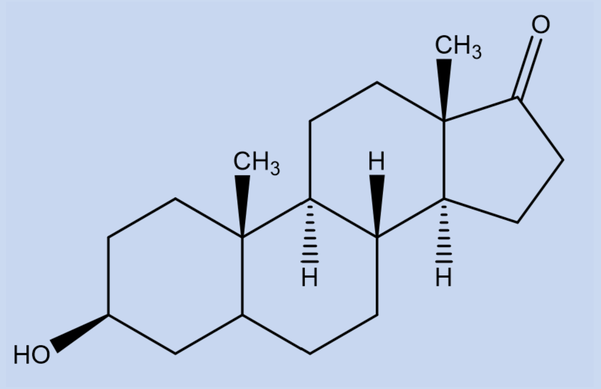


Figura 1 *- Estrutra química da Epiadrosterona.*

Metodologias

Síntese

1. Estratégias Convencionais

Estas estratégias basearam-se principalmente na interconversão de grupos funcionais, na alteração de posição das insaturações e/ou na introdução de heteroátomos [5].

2. Reações Multicomponente (MCR)

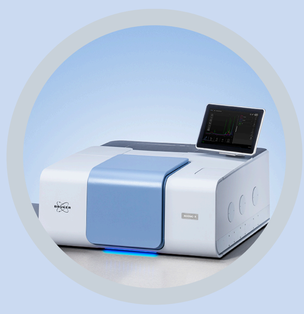
As MCR viabilizam a obtenção de compostos-alvo com elevada economia atómica através de processos *one-pot*, envolvendo três ou mais reagentes [6].

Caracterização Estrutural

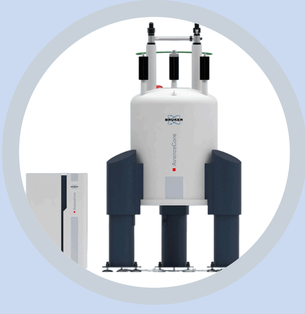
A caracterização estrutural dos compostos sintetizados recorrerá a um conjunto integrado de várias técncias consideradas padrão/essenciais tanto nas análises de antidopagem como nas análises para elucidação estrutural [7,8].



Espectrometria de Massa



Espectroscopia de Infravermelho por Transformada de *Fourier*



Ressonância Magnética Nuclear

Conclusão

Com este projeto pretende-se desenvolver moléculas nunca antes descritas, através de metodologias sustentáveis e que conduzem a elevada diversidade estrutural, gerando novos derivados de esteróides passíveis de serem devidamente caracterizados e avaliados, de forma a:

- **Promover a formação científica especializada;**
- **Produzir conhecimento analítico avançado; e**
- **Capacitar laboratórios forenses, instituições judiciais e autoridades de controlo de antidopagem com ferramentas periciais robustas para a aplicação da lei, a sustentação probatória e a defesa da ética desportiva.**

BIBILIOGRAFIA

[1] García-Arnés JA, García-Casares N. Revista Clínica Española (English Edition) 2022;222:612–20. https://doi.org/10.1016/j.rceng.2022.09.003.

[2] Coimbra MA, Barbosa FS, Scheid C, Macedo SMD, Yonamine M, Merib JO, et al. Forensic Sci Int 2021;328. https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2021.111012.

[3] Rahnema CD, Crosnoe LE, Kim ED. Andrology 2015;3:150–5. https://doi.org/10.1111/andr.307.

[4] He G, Zhu S, Liu X, Wang Z, Zhang L, Lu J, et al. Drug Test Anal 2026. https://doi.org/10.1002/dta.70105.

[5] Wiacek M, Zubrzycki IZ. Int J Mol Sci 2026;27. https://doi.org/10.3390/ijms27062581.

[6] Kumar S, Arora A, Kumar S, Kumar R, Maity J, Singh BK. Eur Polym J 2023;190. https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2023.112004.

[7] Ortiz Ortega E, Hosseinian H, Aguilar Meza IB, Rosales López MJ, Rodríguez Vera A, Hosseini S. Material Characterization Techniques and Applications. vol. 19. Singapore: Springer Singapore; 2022.

[8] Leogrande P, Botrè F, Torre X, Jardines D, Parr MK, Marini F. Talanta 2021;227. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.122173.