

Síntese de (*E*)-2-hidroxi-3-(2-(1-fenil-1*H*-1,2,3-triazol-4-il)vinil)-1,4-naftoquinona Via Acoplamento de Heck

Luana S. M. Forezi* (PQ), **Dora C. S. Costa** (PG), **Vitor F. Ferreira** (PQ), **Fernando C. da Silva** (PQ)
luanaforezi@hotmail.com

Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica
Outeiro de São João Batista-s/n° - Campus do Valonguinho – CEP - 24020-150 - Niterói – RJ, Brasil

Palavras Chave: Naftoquinonas, 1,2,3-triazóis, Reações de Heck

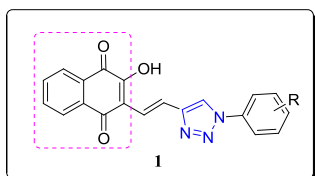
Abstract

“Synthesis of (*E*)-2-hydroxy-3-(2-(1-phenyl-1*H*-1,2,3-triazol-4-yl)vinyl)-1,4-naphthoquinone Via coupling Heck”. This work involves the synthesis of naphthoquinones employing the Heck conditions. The compounds are under biological evaluation.

Introdução

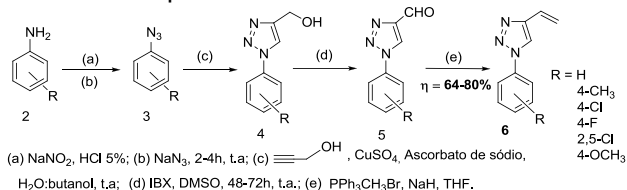
As quinonas naturais estão presentes em várias famílias de plantas, fungos, bactérias e insetos, ligando as cadeias de transporte de elétrons na via metabólica com os processos oxidativos. Em estudos farmacológicos as quinonas apresentam uma grande versatilidade biológica destacando-se suas propriedades microbicidas, tripanomicidas, viruscidas, antitumorais, entre outras.^{1,2}

Estudos têm sido realizados por nosso grupo de pesquisas com o intuito de preparar novos derivados naftoquinônicos com melhor espectro de ação contra diversos alvos biológicos. Em continuação às nossas pesquisas nesta área, propusemos a síntese de novos derivados 1,4-naftoquinônicos contendo o grupamento 1,2,3-1*H*-triazólico conjugado, empregando as condições de Heck. Estas substâncias terão suas aplicações biológicas avaliadas.



Resultados e Discussão

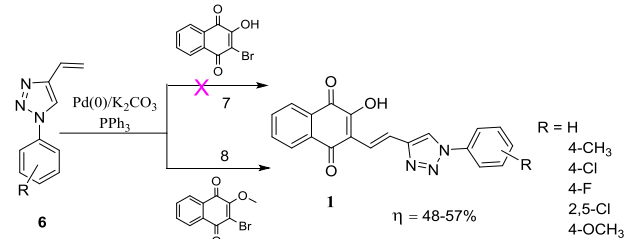
A fim de promover o acoplamento entre o núcleo 1,4-naftoquinônico e 1,2,3-vinil triazol, realizou-se a síntese dos derivados 4-vinil-1,2,3-1*H*-triazóis (**6**) (**Esquema 1**). Os derivados foram obtidos em rendimentos que variaram de 76 % a 97 %.



Esquema 1. Síntese dos vinil-triazóis **6**

Em seguida, realizou-se o acoplamento entre os núcleos 1,4-naftoquinona e 1,2,3-1*H*-triazólicos

empregando-se as condições de Heck conforme mostrado no **Esquema 2**.



Esquema 2. Reação entre os vinil-triazóis **6** e as naftoquinonas **7** e **8**

Acredita-se que a reatividade diminui devido à formação do lausonato. Desse modo empregou-se a bromo-lausona protegida o que promoveu a efetivação da mesma. Todas as novas substâncias tiveram suas estruturas confirmadas por métodos físicos de análise, tais como RMN de ¹H e ¹³C e IV. Também foi realizada a caracterização estrutural por difração de raios X da substância **1a**, fato que confirma inequivocamente sua obtenção e a sua estereoquímica *E*. A figura *ORTEP* da estrutura está representada na **Figura 1**.

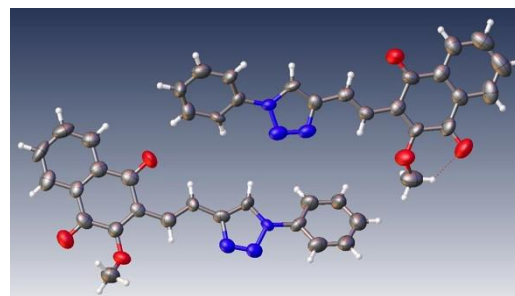


Figura 1. Estrutura *ORTEP* da substância **1a**

Conclusões

A metodologia empregada para a reação de acoplamento cruzado entre os derivados **6** e **8** se mostrou eficiente e o produto foi obtido na configuração *E*, como esperado.

Os compostos sintetizados serão enviados para análises biológicas no que se refere a atividades antitumorais e tripanocidas.

Agradecimentos

Capes, CNPq e FAPERJ

¹ Jordão, A. K.; Vargas, M. D.; Pinto, A. C.; da Silva, F. C. e Ferreira, V. F. *RSC Adv.* **2015**, *5*, 67909.

² da Silva, F. C. e Ferreira, V. F. *Curr. Org. Synth.* **2016**. In Press.