



## SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE NAFTOQUINONAS 2,3-BIS-(N-HETEROCICLO)-SUBSTITUÍDAS

**HSUAN, Tseng Hsiao**<sup>1</sup> (ana\_shiao@hotmail.com); **BRAGA, Rangel Santos**<sup>1</sup> (rangebraga@gmail.com); **TIRLONI, Bárbara**<sup>2</sup> (barbara.tirloni@ufsm.br); **SCHWALM, Cristiane Storck**<sup>3</sup> (cristianeschwalm@ufgd.edu.br)

<sup>1</sup>Discente do curso de Química da UFGD;

<sup>2</sup>Docente do curso de Química da UFSM;

<sup>3</sup>Docente do curso de Química da UFGD.

A síntese e caracterização de naftoquinonas 2,3-bis-(*N*-aril)-substituídas é uma área de pesquisa que tem atraído bastante interesse da comunidade científica, especialmente devido as atividades biológicas atribuídas à esta classe de compostos. No entanto, derivados correlatos 2,3-bis-(*N*-heterociclo)substituídos são ainda pouco explorados na literatura e os poucos exemplos descritos – principalmente na área de corantes – muitas vezes não apresentam caracterização molecular ou fotofísica completa. Neste trabalho, descrevemos a preparação de naftoquinonas 2,3-bis-(*N*-heterociclo)substituídas com foco na introdução de heterociclos contendo um segundo átomo de *N* (com pares de elétrons não ligantes); desta maneira, garantimos a presença de sítios de coordenação adicionais nos compostos obtidos e viabilizamos o estudo de sua química de coordenação – que pode ser futuramente explorada no contexto de catálise homogênea, outro interesse de nosso grupo de pesquisa. Como primeira etapa da síntese dos compostos propostos efetuou-se a bromação da 1,4-naftoquinona (reagente comercial) com Br<sub>2</sub> utilizando HOAc como solvente; através deste procedimento, realizado em escala multigrama, obteve-se a naftoquinona 2,3-dibromada em 74% de rendimento. Este intermediário-chave foi então submetido a reações de substituição com excesso de benzotriazol, pirazol e 3,5-dimetil-pirazol, levando aos respectivos produtos dissubstituídos que - em uma primeira abordagem – foram isolados e purificados via recristalização, sendo obtidos com rendimentos inferiores a 30%. Optou-se então por reinvestigar estas reações utilizando cromatografia em coluna de sílica-gel como método de purificação: desta maneira os três produtos puderam ser obtidos com rendimentos melhorados de 42, 58 e 64%, respectivamente. Os derivados obtidos foram caracterizados por espectroscopia de absorção no infravermelho (IV) e ultravioleta-visível (UV-Vis) e ressonância magnética nuclear (RMN) de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C. Além disso, o derivado bis-benzotriazólico teve a sua estrutura cristalográfica, não descrita na literatura, determinada via difratometria de raios X em monocristal. Estudos visando a caracterização fotofísica destes compostos, bem como a obtenção de complexos com metais de transição, como paládio e cobre(II), estão sendo desenvolvidos em nosso grupo de pesquisa.

**Palavras-chave:** naftoquinonas, heterociclos nitrogenados, pirazol

**Agradecimentos:** À UFGD pela bolsa de IC e Pesquisador Ingressante concedida aos autores vinculados a esta Instituição.