

PESQUISA/INICIAÇÃO CIENTÍFICA - PESQUISA/ INICIAÇÃO CIENTÍFICA

ESTUDOS VISANDO A SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DA 2-(ANILINO)-3-(PIRAZOIL)-1,4-NAFTOQUINONA

Eduarda Orrigo (eduarda.0908santos@gmail.com)

Andriely Costa De Mattos (andriely.mattos057@academico.ufgd.edu.br)

Cristiane Storck Schwalm (cristianeschwalm@ufgd.edu.br)

A síntese e caracterização de 1,4-naftoquinonas contendo substituintes nitrogenados nas posições 2 e 3 vem atraindo bastante interesse, especialmente devido à ampla gama de atividades biológicas. Além disso, a presença de duas unidades coordenantes ligadas ao núcleo naftoquinona permite que tais compostos sejam utilizados como ligantes em química de coordenação com metais de transição, campo nos quais derivados pirazólicos também se destacam. Neste contexto, temos como objetivos a síntese e caracterização de uma 1,4-naftoquinona 2-anilino 3-pirazol substituída inédita para posterior aplicação na obtenção de complexos de Pd(II). Para a obtenção do produto desejado, duas rotas seriam possíveis a partir da 2,3-dicloro-1,4-naftoquinona (DQ), uma com a adição do pirazol e posterior adição da anilina, e a outra com a ordem inversa. Inicialmente realizamos diversas reações entre a DQ e pirazol, mas em todos os casos foi obtido o derivado bis-pirazólico como único produto, mesmo quando um excesso da DQ foi utilizado. Resultados semelhantes foram obtidos utilizando o 3,5-dimetilpirazol, que é estericamente mais impedido. Desta forma, pode-se concluir que a incorporação do primeiro núcleo pirazólico ativa o substrato para a segunda reação de substituição. Passamos então a explorar a segunda opção, para a

qual a reação da DQ com anilina foi realizada em água, sob aquecimento, levando ao intermediário mono-anilino com rendimento de 40%. No entanto, tentativas de reagir este composto com pirazol para obtenção do produto final desejado foram infrutíferas – sem consumo do material de partida. Provavelmente, este resultado foi consequência da desativação da segunda posição clorada pela doação de densidade eletrônica pela anilina. Optamos então por acilar a porção anilino, a fim de diminuir seu efeito doador de elétrons – o que foi realizado utilizando-se anidrido acético na presença de ácido sulfúrico, fornecendo o produto acetilado com rendimento de 27% de rendimento. A reação deste composto com pirazol, sob aquecimento, forneceu uma mistura complexa de produtos. Após separação por cromatografia em coluna, foi possível isolar uma pequena quantidade de produto puro, suficiente para confirmar a obtenção do derivado acetil-anilino pirazol por ressonância magnética nuclear (RMN) de hidrogênio de carbono-13. Embora o produto final não tenha sido obtido, através deste estudo foi possível estabelecer que uma modificação da segunda rota proposta - com adição de anilina à DQ, seguida de acetilação e então reação com pirazol – é um caminho sintético viável para a obtenção da 1,4-naftoquinona 2-anilino 3-pirazol substituída desejada. Além disso, todos os demais produtos e intermediários obtidos até então tiveram sua estrutura confirmada por RMN. Novos estudos para otimização das reações realizadas bem como para obtenção do produto final após a etapa de hidrólise do grupo acetil serão futuramente realizadas em nosso laboratório.

Agradecimentos: Agradecemos à FUNDECT pela concessão da bolsa de Iniciação Científica .

Palavras-chave: naftoquinona; pirazol; anilina.