

## Substituição nucleofílica aromática em derivados de quinoxalina

Fabrizio Gava Menezes (PG), Fabio da Silva Miranda (PQ), Juan Ricardo (PG), Adailton J, Bortoluzzi (PQ), Hugo Gallardo (PQ) e César Zucco (pq) \*. [czucco@qmc.ufsc.br](mailto:czucco@qmc.ufsc.br); [czucco@fapescsc.sc.gov.br](mailto:czucco@fapescsc.sc.gov.br)

Departamento de Química – Universidade Federal de Santa Catarina – Florianópolis – SC 88040-970

Palavras Chave: quinoxalina; aminas; substituição nucleofílica aromática

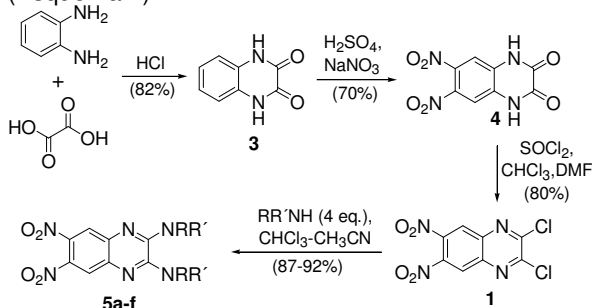
### Introdução

Ligantes contendo unidades heterocíclicas possuem inúmeras aplicações em diversas áreas, tais como bioquímica e materiais.<sup>1</sup> Nesse contexto, derivados de quinoxalina têm sido relatados em inúmeros trabalhos científicos em função de seus usos como agentes terapêuticos para os mais variados fins e em dispositivos tecnológicos, tais como cristais líquidos e OLED.<sup>2</sup>

O presente trabalho visa explorar a natureza elétron-deficiente do grupamento quinoxalina como ativadora para reações de substituição nucleofílica aromática nas posições 2 e 3 do respectivo heterociclo, quando estas contêm átomos de cloro, facilmente inseridos na molécula. Dessa forma, foram preparados os derivados **1** e **2**, e, em seguida, colocados para reagir com diferentes aminas. Possíveis aplicações dos derivados amínicos obtidos são relatadas.

### Resultados e Discussão

O substrato **1** foi obtido em três etapas, sendo seguidamente colocado para reagir com diferentes aminas, o que levou à formação dos respectivos derivados 2,3-diamínicos, **5a-g**, via substituição de ambos os cloros, com rendimentos de 87-92% (Esquema 1).

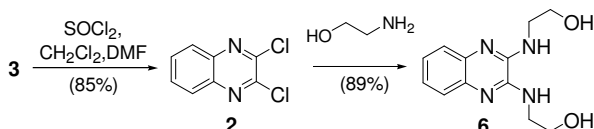


RR'NH = a. metilamina; b. *n*-propilamina; c. *i*-propilamina; d. *n*-butilamina; e. *t*-butilamina; f. pirrolidina; g. piperidina.

#### Esquema 1

Verificou-se que o substrato **1** é altamente ativado para substituição nucleofílica aromática, em função da presença de dois grupos nitro nas posições 6 e 7. Todavia, a natureza elétron-atraente do anel quinoxalina foi confirmada a partir da reação de **2**, obtido em duas etapas com etanolamina,

fornecendo o composto **6** com rendimento de 89% (esquema 2).



#### Esquema 2

Os produtos das reações foram caracterizados por CHN, IV, RMN de <sup>1</sup>H, RMN de <sup>13</sup>C e espectrometria de massas. Ainda, o derivado **5f**, fruto da reação de **1** com pirrolidina, teve sua estrutura determinada por cristalografia de raios-X (Figura 1), e suas propriedades de absorção UV-Vis e fluorescência avaliadas.

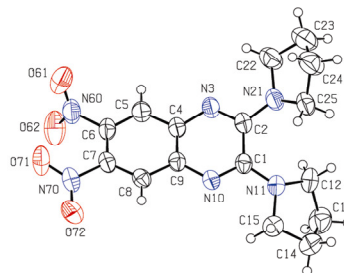


Figura 1. Estrutura cristalográfica do composto **5f**.

Os derivados amínicos obtidos estão sendo avaliados para possíveis aplicações, tais como dispositivos emissores de luz (em função de possuírem simultaneamente grupos doadores e retiradores de elétrons unidos por um sistema aromático conjugado) e como precursores de complexos de coordenação e de ligantes macrocíclicos.

### Conclusões

Os substratos **1** e **2** são adequados para realizar reações de substituição nucleofílica aromática de forma a gerarem derivados que possam ter aplicações em diferentes áreas.

### Agradecimentos

UFSC, FAPESC, CAPES, CNPq, INCT<sub>Cat</sub>.

<sup>1</sup> Miranda et. al. *J. Mol. Struct.* **2009**, 938, 1.

<sup>2</sup> Menezes, F.G. tese de Doutorado, UFSC, **2010**.