



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO



**“SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE AMINO DERIVADOS DE
NAFTOQUINONAS”**

**TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE
MAestrÍA EN CIENCIAS QUÍMICAS**

PRESENTA:

Q.F.B. LAURA KARINA TRUJILLO ESPINOZA

DIRECTOR DE TESIS:

DRA. ELISA LEYVA RAMOS

COMITÉ TUTORIAL

DRA. SARAÍ VEGA RODRÍGUEZ

DRA. SILVIA ELENA LOREDO CARRILLO

San Luis Potosí, S.L.P., Enero 2022

CREDITOS INSTITUCIONALES

Esta tesis fue elaborada en el Laboratorio de Síntesis Orgánica de la facultad de Ciencias Químicas en la Universidad Autónoma de San Luis Potosí bajo la dirección de la Dra. Elisa Leyva Ramos y con la colaboración de la Dra. Silvia Elena Loredó Carrillo.

El programa de Maestría en Ciencias Químicas de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí pertenece al Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) del CONACyT, registro 520, en el Nivel consolidado. Durante el desarrollo del proyecto de investigación el autor recibió una beca académica otorgada por Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) número 955513.

En base al documento operativo de los Posgrados de la Facultad de Ciencias Químicas de la UASLP, se declara que Laura Karina Trujillo Espinoza, estudiante de la Maestría en Ciencias Químicas y la Dra. Elisa Leyva Ramos son los autores del trabajo reportado y que asumen la responsabilidad de su contenido. La divulgación de cualquier sección del documento queda supeditada a la aceptación de esta acción por parte de los directores de tesis. Esta divulgación se hará con fines académicos y en todos los casos se deberán dar los créditos correspondientes al CONACyT y a la Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

Se firma el presente documento de común acuerdo en la Ciudad de San Luis Potosí S.L.P El 14 de Enero de 2022.

Q.F.B. Laura Karina Trujillo Espinoza

Dra. Elisa Leyva Ramos

Dra. Silvia Elena Loredó Carrillo

Dra. Saraí Vega Rodríguez



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO



**“SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE AMINO DERIVADOS DE
NAFTOQUINONAS”**

**TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRÍA EN CIENCIAS QUÍMICAS**

PRESENTA:

Q.F.B. LAURA KARINA TRUJILLO ESPINOZA

DIRECTOR DE TESIS:

DRA. ELISA LEYVA RAMOS

COMITÉ TUTORIAL

DRA. SARAÍ VEGA RODRÍGUEZ

DRA. SILVIA ELENA LOREDO CARRILLO

SINODALES

DRA. ELISA LEYVA RAMOS

DRA. SARAÍ VEGA RODRÍGUEZ

DRA. SILVIA ELENA LOREDO CARRILLO

San Luis Potosí, S: L. P. Enero 2022

San Luis Potosí S.L.P.

28 de Noviembre del 2021

Comité Académico del Posgrado en Ciencias Químicas

Facultad de Ciencias Químicas/UASLP

Presente

Por medio de la presente comunicamos que la tesis llevada a cabo por la alumna de maestría Q.F.B. Laura Karina Trujillo Espinoza, titulada “Síntesis y caracterización de amino derivados de naftoquinonas”, ha sido concluida y aprobada por el comité tutorial para dar inicio a los trámites correspondientes a su titulación. El examen de grado tendrá lugar el próximo 14 de Enero del año 2022, alas 10:00 am en la Sala Audiovisual adjunta a la Hemeroteca de la Facultad de Ciencias Químicas de la UASLP.

ATENTAMENTE

Dra. Elisa Leyva Ramos

Director de Tesis

Dra. Silvia Elena Loredó Carrillo

Comité tutorial

Dra. Saraí Vega Rodríguez

Comité tutorial



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE AMINO DERIVADOS DE NAFTOQUINONAS by Laura Karina Trujillo Espinoza is licensed under a Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-SinObraDerivada 4.0 Internacional License.

AGRADECIMIENTOS

- A la Dra. Elisa Leyva Ramos por darme la oportunidad de desarrollarme como parte de su grupo de investigación, por su comprensión y por todas las enseñanzas.
- A la Dra. Silvia Loredó y a la Dra. Saraí Vega por su participación y apoyo para la realización de este proyecto.
- A la UASLP y al posgrado en Ciencias Químicas por aceptarme como parte de sus estudiantes.
- A todos los profesores que han formado parte de mi carrera profesional, por compartir sus conocimientos conmigo y siempre ayudarme a seguir adelante.
- A mis amigos y compañeros de la facultad, por todos esos momentos de diversión, por las horas compartidas y por siempre ayudarme en momentos de dificultad. Christian, Diego, Brenda, Saúl, Jaime, Ana.
- A mi gran amiga Johana por siempre estar ahí para escucharme, por compartir siempre juntas nuestros logros y nuestras derrotas, nuestros momentos de felicidad y de tristeza y porque sé que en ella puedo encontrar más que a una amiga, a una hermana.
- A mi abuelita Celia QEPD por siempre inspirarme a lograr mis sueños sin importar lo que la sociedad creyera.
- A mi familia por haberme inculcado los valores que me ayudaron a llegar hasta este momento y por enseñarme que cuando queremos algo en la vida debemos luchar siempre por conseguirlo.
- A Hugo Enrique Flores Orozco por todo el apoyo económico y emocional que me ha brindado desde el inicio de mi carrera profesional, por ser uno de los pilares que me mantuvo adelante y por siempre creer en mí.
- A la señora María Dominga Orozco, Itzel y Erick Flores por el apoyo que siempre me brindaron y por arroparme dentro de su familia.
- A la Maestra Mayra Evelia que me inculco el gusto por la rama de la Química y por ser siempre mi ejemplo a seguir.

- A mis compañeros de trabajo Gabriel, Carla, Hugo, Margarita, Moni, Claudia, Ana, Dulce por siempre apoyarme en los momentos donde el cansancio parecía vencerme y por siempre darme esas palabras de aliento que necesité para poder concluir con este proyecto.
- A todas las personas de mi entorno que contribuyeron indirectamente para que yo pudiera realizar este proyecto.
- A CONACyT por la beca otorgada, pues sin ella no hubiera logrado este sueño.

RESUMEN

En el presente trabajo se realizó la síntesis de derivados aminados de naftoquinonas que poseen propiedades farmacológicas de gran interés. Todos los derivados se obtuvieron utilizando síntesis convencional y síntesis asistida por microondas. La caracterización espectroscópica se realizó utilizando varias técnicas como espectroscopia UV-Vis, IR, RMN¹H, RMN¹³C y espectrometría de masas.

Como primera parte del proyecto se sintetizó una serie de derivados 2-fenilamino-5-hidroxi-1,4-naftoquinona sustituidos con grupos flúor en diferentes posiciones, y de esta manera se explicó el efecto que dichos sustituyentes tienen sobre la formación de puentes de hidrógeno intramoleculares de dos y tres centros. Varios estudios han demostrado que cuando los derivados de naftoquinona presentan puentes de hidrógeno, se observa un efecto positivo en las propiedades biológicas de las moléculas. La espectroscopía IR permite analizar la formación de puentes de hidrógeno por medio de bandas características y sus desplazamientos. La segunda familia de derivados sintetizados fue la 2-fenilamino-3-Cl-1,4-naftoquinona con grupos electrodonadores como sustituyentes, al igual que en el caso anterior se evaluó el efecto que estos grupos ejercen sobre la formación de los puentes de hidrógeno. Cuando los sustituyentes se encuentran en posición cuatro con respecto al grupo amino los rendimientos son mayores.

Utilizando los derivados anteriores mediante termólisis con azida de sodio se obtuvieron los derivados benzo[2,3-b]fenazin-6,11-diona y 2-fenilamino-3-amino-1,4-naftoquinona como productos de reacción, cuando tenemos un sustituyente electrodonador fuerte (-OCH₃), los rendimientos del derivado benzo[2,3-b]fenazino-6,11-diona se ven favorecidos, ocurriendo lo contrario cuando el sustituyente es un grupo electrodonador débil (CH₃). Se estudió también la comparación entre los rendimientos obtenidos con las dos metodologías de síntesis utilizadas.

En general, en todas las reacciones que se llevaron a cabo en este estudio, la síntesis asistida con microondas generó mayores rendimientos y menores tiempos.

Palabras Clave: Naftoquinona, fenazina, puente de hidrógeno, termólisis, microondas

ABSTRACT

In the present study, the synthesis of amino derivatives of naphthoquinones was performed. These derivatives possess pharmacological properties of great interest. All of the derivatives were obtained using conventional synthesis and synthesis assisted by microwave. The spectroscopic characterization was made using different analytical techniques like spectroscopy UV-Vis, RMN¹H, RMN¹³C y mass spectrometry.

In the first part of this project a series of derivatives 2-phenylamine-5-hydroxy-1,4-naphthoquinone substituted with fluorine groups at different positions were synthesized. The fluoro substituents have an effect on the formation of intramolecular hydrogen bonds of two or three centers depending on the position they occupy in the aromatic ring. Various studies have demonstrated that when the naphthoquinone derivatives present hydrogen bonds a positive effect is observed on the biological properties of the molecules. IR spectroscopy allows to analyze the formation of the hydrogen bonds by means of the form of their characteristic bands and their displacements.

The second family of derivatives synthesized were the 2-phenylamine-3-Cl-1,4-naphthoquinone with electron donor groups as substituents. As in the previous case, the effects that these groups exercised on the formation of hydrogen bonds was also evaluated. When the substituents are in the four position with respect to the amino group the yields are higher.

Using the aforementioned derivatives, performing thermolysis with sodium azide benzo[2,3-b]phenazine-6,11-diona and 2-phenylamine-3-amino-1,4-naphthoquinone were obtained. Having a strong electron donor (-OCH₃) as a substituent, the yields of the benzo[2,3-b]phenazine-6,11-diona derivative are favored, the opposite takes place when we have a weak electron donor (CH₃). A comparison between the yields obtained using conventional heating and microwave irradiation was also performed. In general, in all the reactions performed in this study, the synthesis assisted by microwave generated higher yields and lower reaction times.

Keywords: Naphthoquinone, phenazine, hydrogen bonds, thermolysis, microwave