1Pot2Cat: Catálise Bimetálica *One-pot* para a Síntese de Compostos *N*-heterocíclicos

>
Vasco Bonifácio
vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

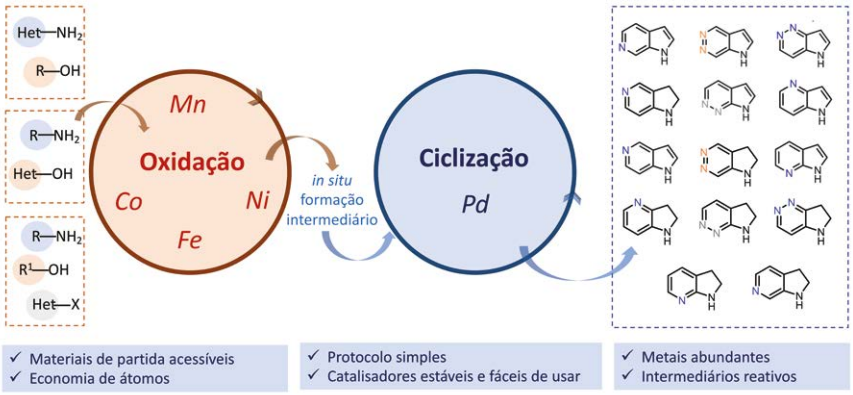
Uma análise recente dos fármacos aprovados pela *Food and Drug Administration* (FDA) nos EUA revela que 59% dos que são constituídos por pequenas moléculas contêm um anel *N*-heterocíclico. O acesso a uma ampla variedade de compostos *N*-heterocíclicos funcionalizados é crítico para impulsionar um desenvolvimento mais eficiente de programas de descoberta de novos fármacos, o que permitirá um progresso muito significativo na saúde e no desenvolvimento global.

Azaindoles, diazaindoles e os correspondentes análogos heterocíclicos saturados/aromáticos são compostos *N*-heterocíclicos valiosos que já deram origem a novos agentes terapêuticos. Embora raros na natureza, os azaindoles são muito interessantes para estratégias de otimização de fármacos, pois permitem a modificação da regra de Lipinski e a modulação das propriedades ADMET, representando uma enorme vantagem sobre outros compostos heterocíclicos bicíclicos fundidos. Uma limitação que é crítica na investigação destes núcleos é a falta de um método sintético simples e eficiente usando materiais de partida disponíveis.

Este projeto pretende desenvolver uma via sem precedentes para a síntese destes compostos *N*-heterocíclicos, consistindo numa reação *one-pot* catalisada por metais, como um protocolo simples e sustentável, usando álcoois disponíveis e aminas (heteroaromáticas). O projeto irá estimular a síntese de compostos *N*-heterocíclicos, anteriormente inacessíveis, com elevado impacto na indústria farmacêutica. Para alcançar este objetivo, o projeto envolve uma equipa com conhecimento na área da química orgânica e da química organometálica.

A abordagem representa uma plataforma promissora para alcançar rapidamente compostos *N*-heterocíclicos: combinando complexos de metais abundantes na terra com catálise de Pd numa reação *one-pot* - 1Pot2Cat!

1Pot2Cat: Catálise bimetálica *one-pot* para a síntese de compostos *N*-heterocíclicos



>
Ficha Técnica do Projeto

Prof.ª Maria Manuel B. Marques
Acrónimo: 1Pot2Cat
Financiamento: Universidade Nova de Lisboa (**UNL**) - PTDC/QUI-QOR/0712/2020.
Equipa: UNL – Maria Manuel Marques (IR), Beatriz Royo (CoIR).
iMed.ULisboa/FF-UL – Pedro Góis.