

Supporting Information

Laurequinone, a lead compound against *Leishmania*

Sara García-Davis^{1,2,†}, Atteneri López-Arencibia^{3,4,5,6,†,*}, Carlos J. Bethencourt-Estrella^{3,4,6}, Desirée San Nicolás-Hernández^{3,4,6}, Ezequiel Viveros-Valdez⁷, Ana R. Díaz-Marrero^{1,8}, José J. Fernández^{1,2}, Jacob Lorenzo-Morales^{3,4,5,6}, José E. Piñero^{3,4,5,6}

¹ Instituto Universitario de Bio-Organica Antonio González (IUBO AG), Universidad de La Laguna (ULL), Avenida Astrofísico Francisco Sánchez 2, 38206 La Laguna, Tenerife, Spain

² Departamento de Química Orgánica, Universidad de La Laguna, Avenida Astrofísico Francisco Sánchez 2, 38206 La Laguna, Tenerife, Spain

³ Instituto Universitario de Enfermedades Tropicales y Salud Pública de Canarias, Universidad de La Laguna, Avenida Astrofísico Francisco Sánchez S/N, 38206 La Laguna, Tenerife, Islas Canarias, Spain

⁴ Consorcio Centro de Investigación Biomédica en Red M.P. de Enfermedades Infecciosas (CIBERINFEC), Instituto de Salud Carlos III, 28006 Madrid, Spain

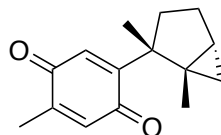
⁵ Departamento de Obstetricia y Ginecología, Pediatría, Medicina Preventiva y Salud Pública, Toxicología, Medicina Legal y Forense y Parasitología, Universidad de La Laguna, Tenerife, Spain

⁶ Red de Investigación Cooperativa en Enfermedades Tropicales (RICET), Spain

⁷ Facultad de Ciencias Biológicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, Avenida Pedro de Alba S/N, San Nicolás de los Garza 66450, Nuevo León, Mexico

⁸ Instituto de Productos Naturales y Agrobiología (IPNA), Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Avenida Astrofísico Francisco Sánchez 3, 38206 La Laguna, Tenerife, Spain

Physical data of laurequinone (**1**)



Laurequinone (**1**)

Yellow oil; $[\alpha]^{25}_{\text{D}} -29$ (c 0.12, CH_2Cl_2)

HRESIMS m/z 229.1231 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calc. $\text{C}_{15}\text{H}_{17}\text{O}_2$, 229.1229)

^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ 0.45 (2H, m, H-12), 1.07 (2H, m, H-3), 1.18 (1H, m, H-5), 1.18 (3H, s, H-15), 1.32 (3H, s, H-14), 1.66 (1H, d, $J = 12.4, 8.1$ Hz, H-4), 1.94 (1H, ddt, $J = 15.7, 7.8, 4.1$ Hz, H-4), 2.02 (3H, d, $J = 1.6$ Hz, H-13), 2.05 (1H, dd, $J = 13.4, 8.2$ Hz, H-5), 6.51 (1H, t, $J = 1.6$ Hz, H-11), 6.87 (1H, s, H-8)

^{13}C NMR (150 MHz, CDCl_3) δ 15.0 (C-12), 15.6 (C-13), 17.8 (C-15), 22.9 (C-14), 23.5 (C-3), 25.2 (C-4), 28.7 (C-2), 35.3 (C-5), 48.2 (C-1), 131.7 (C-8), 135.0 (C-11), 144.2 (C-9), 154.2 (C-6), 188.6 (C-7), 189.2 (C-10).

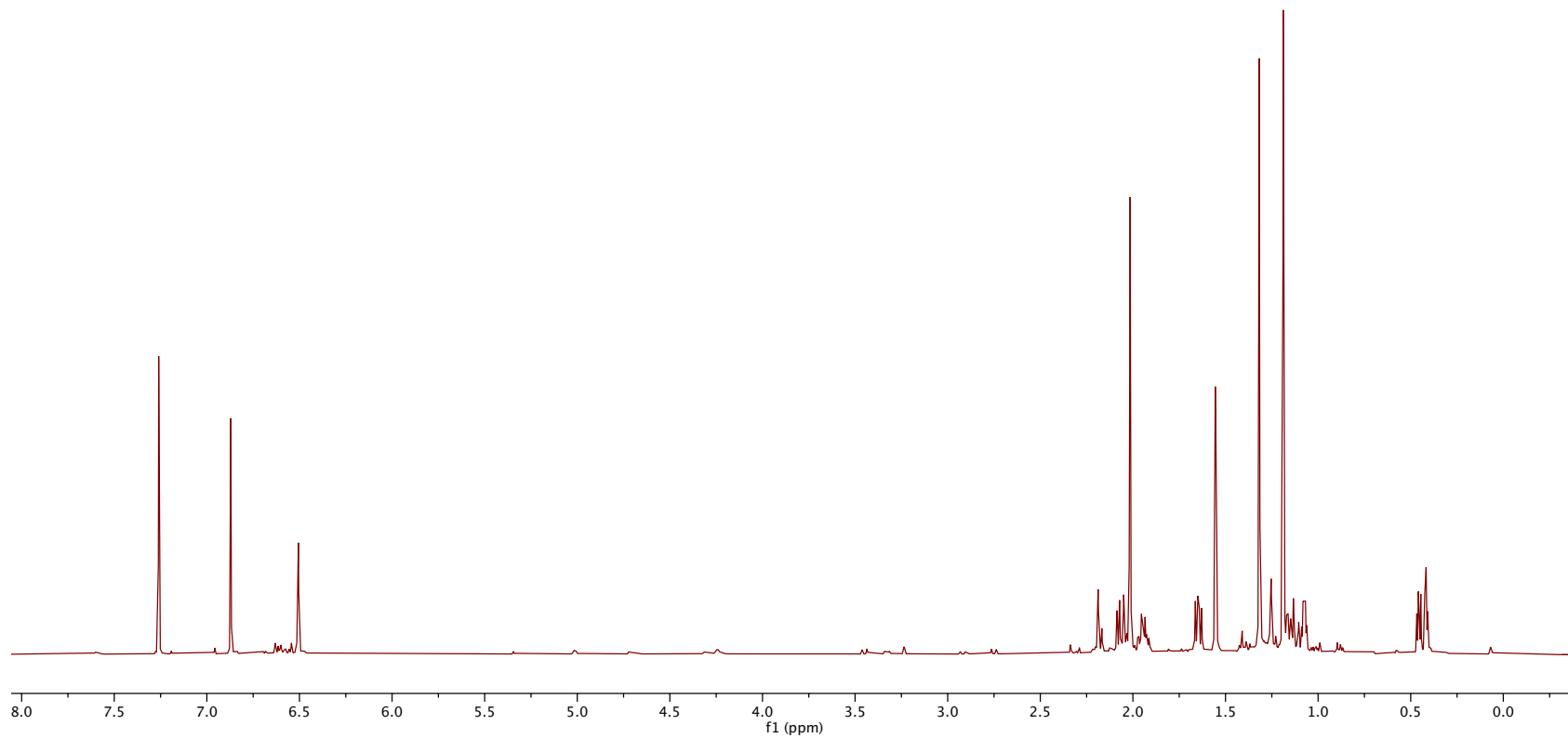


Figure S1: ^1H -NMR spectrum of laurequinone (**1**) at 600 MHz in CDCl_3

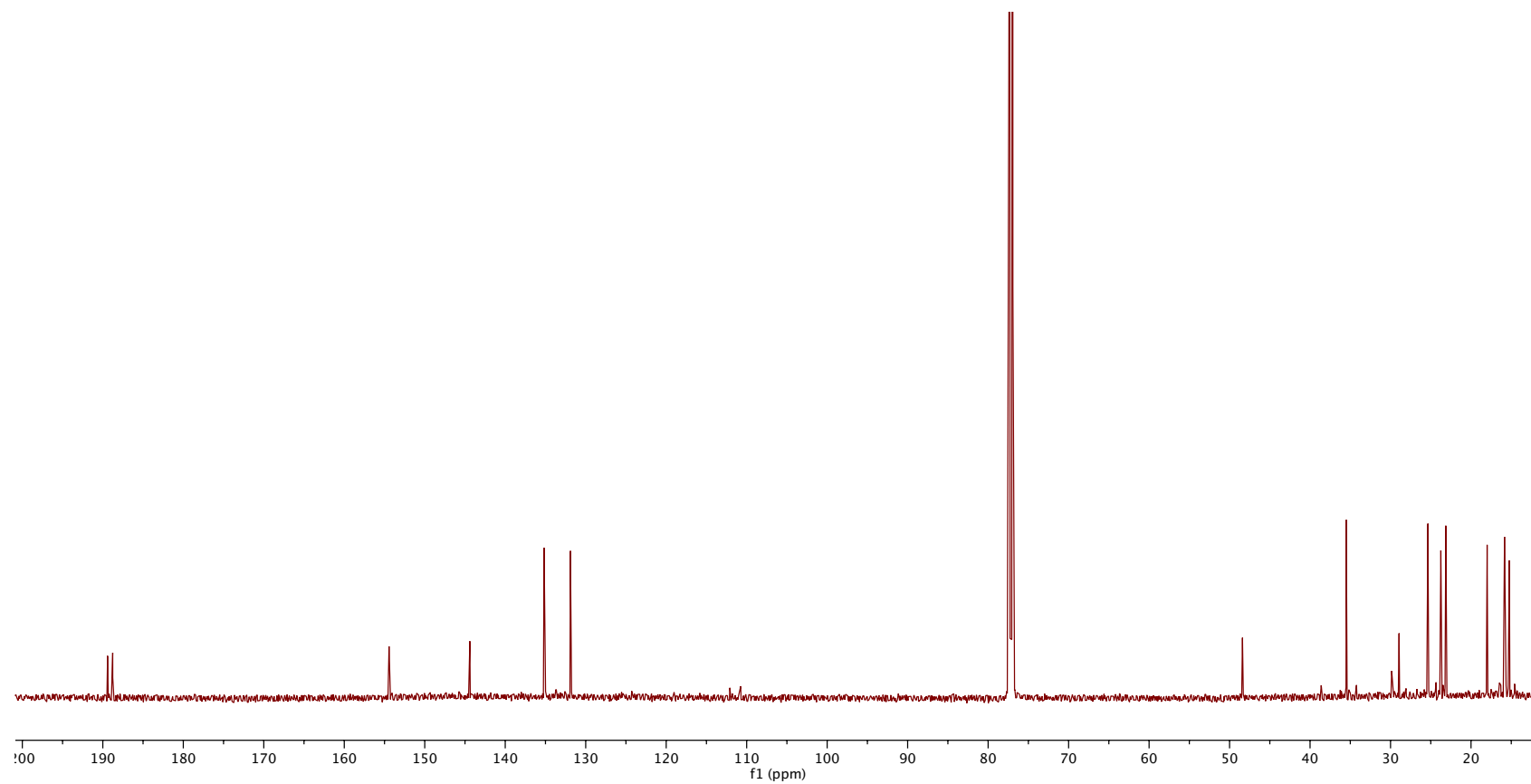


Figure S2: ^{13}C -NMR spectrum of laurequinone (**1**) at 150 MHz in CDCl_3

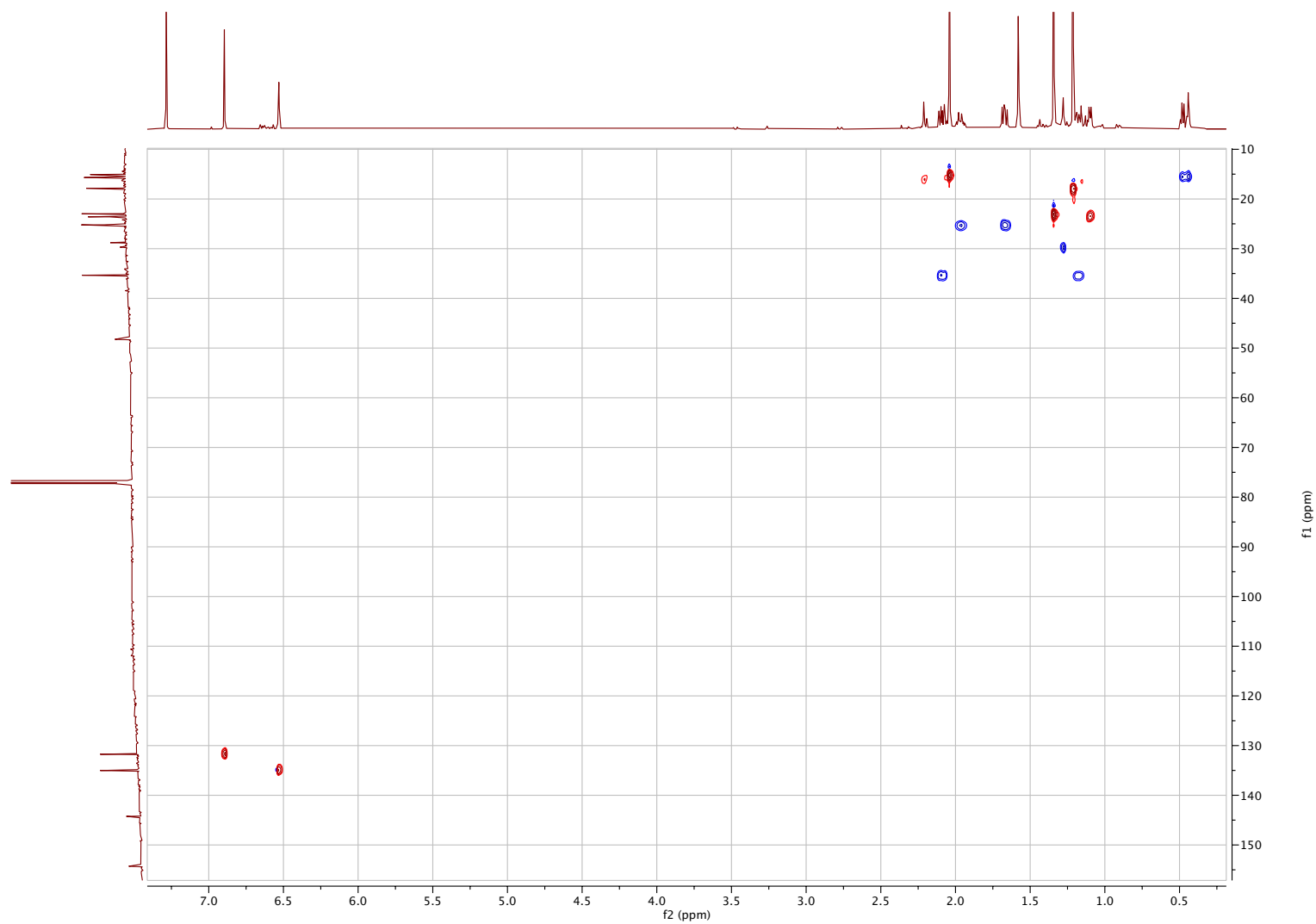


Figure S3: HSQC experiment of laurequinone (**1**) at 600 MHz in CDCl₃

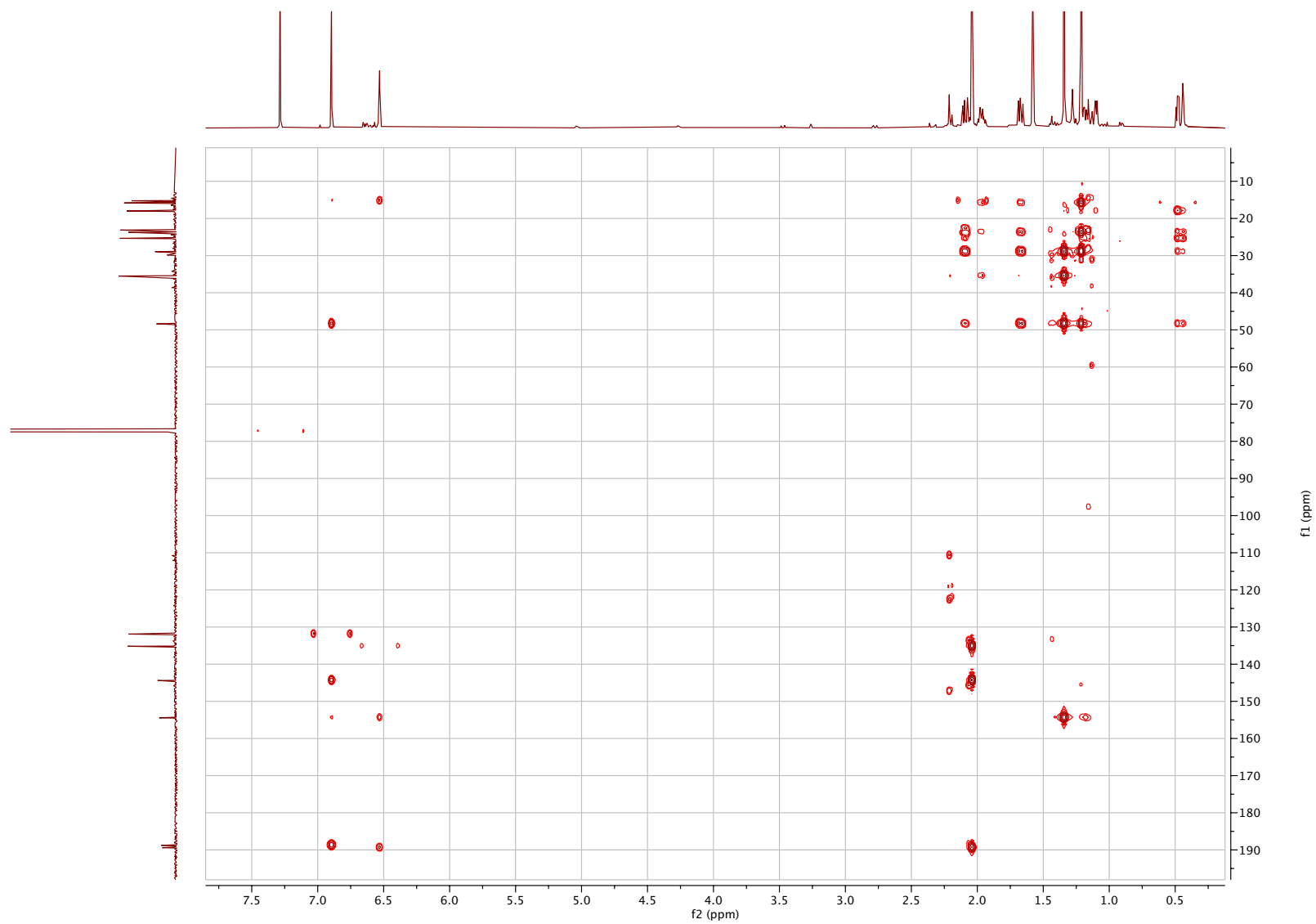


Figure S4: HMBC experiment of laurequinone (**1**) at 600 MHz in CDCl₃