

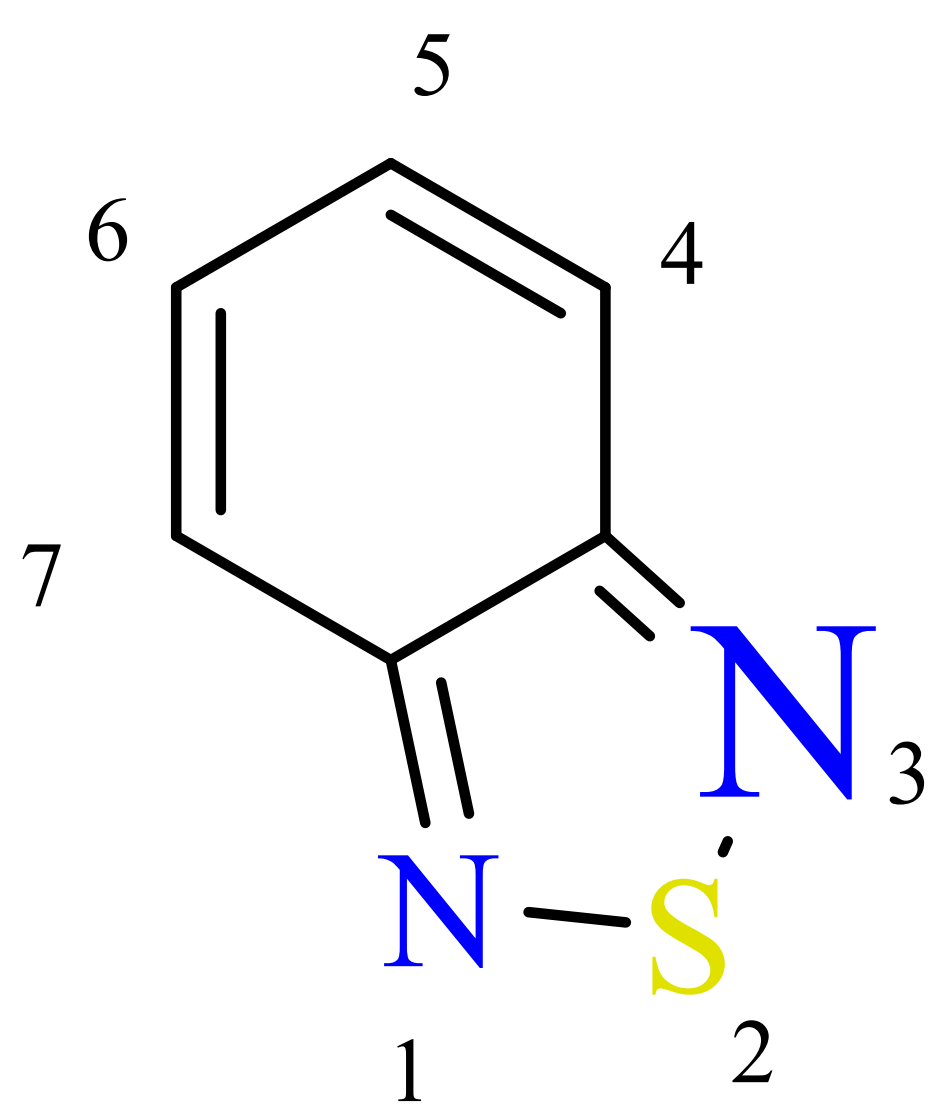
ALQUENILACIÓN REGIOSELECTIVA DEL BENZOTIADIAZOL A TRAVÉS DE UNA ACTIVACIÓN DEL ENLACE C – H CATALIZADA POR Rh-III.

Solorio-Hernández Sergio E., Gonzalez-Becerra José G., Peña-Cabrera Eduardo

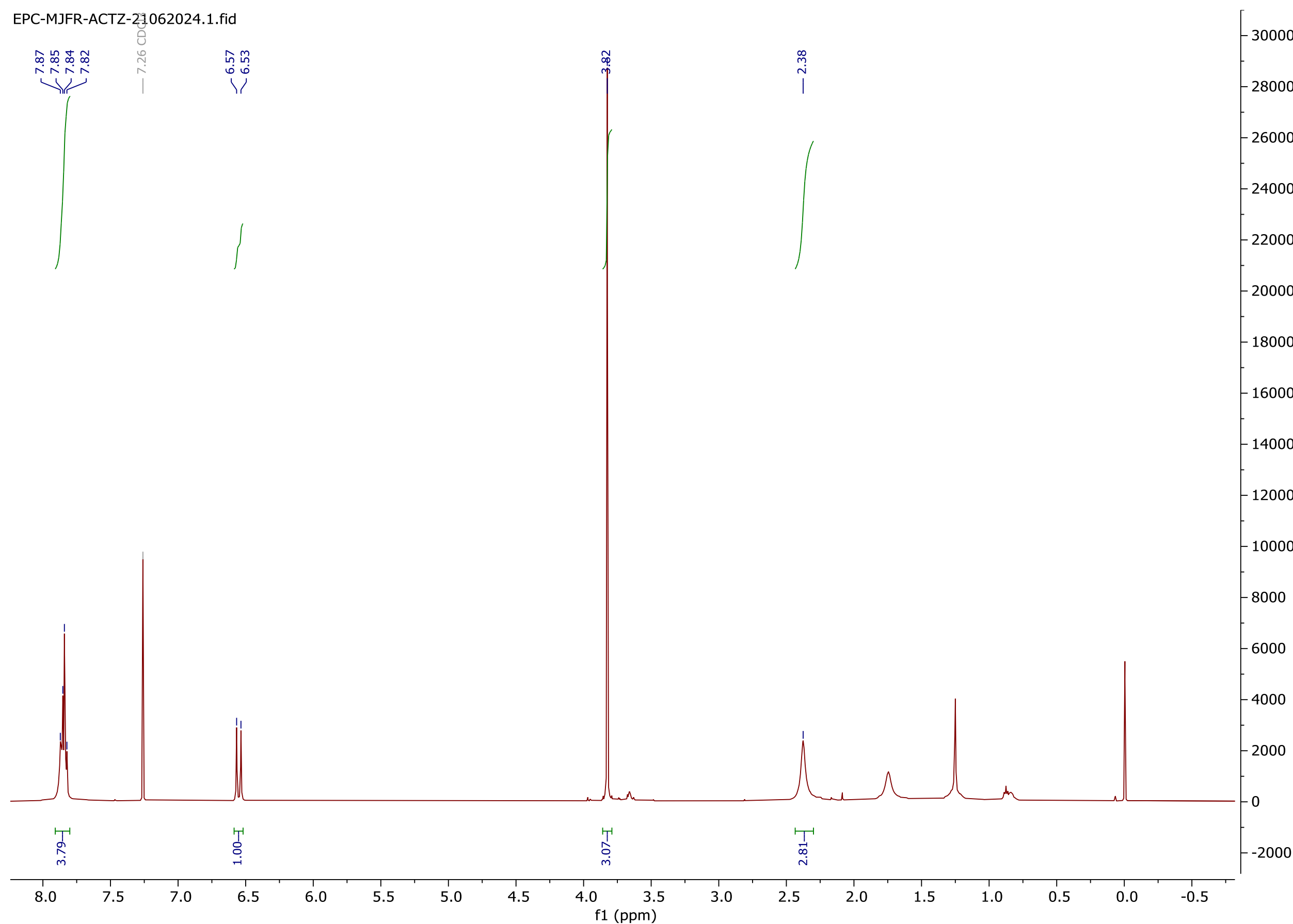
División de Ciencias Naturales Exactas, Departamento de Química, Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, Noria Alta S/N 36050, Guanajuato, Guanajuato, México.

Introducción

Características

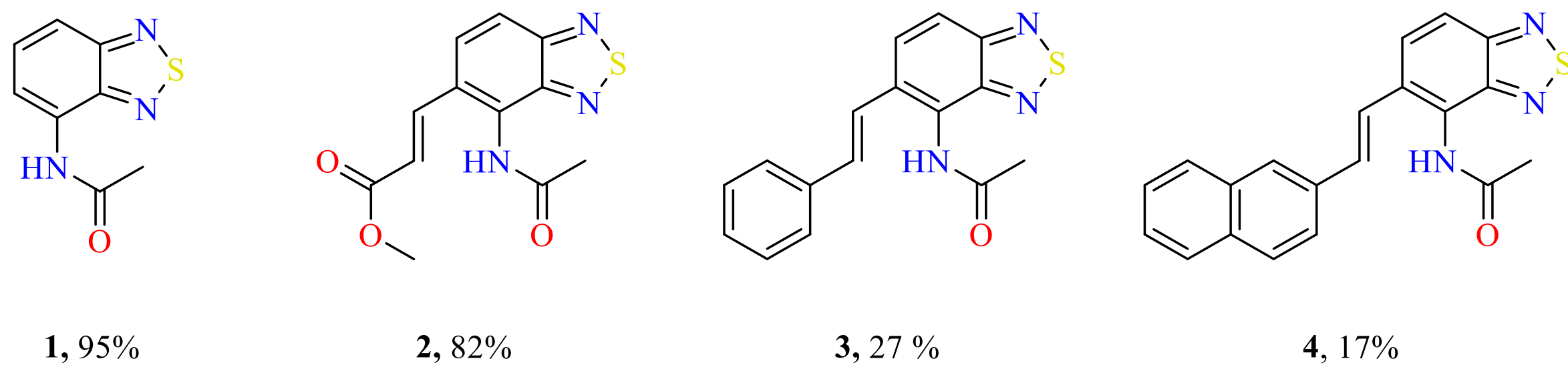
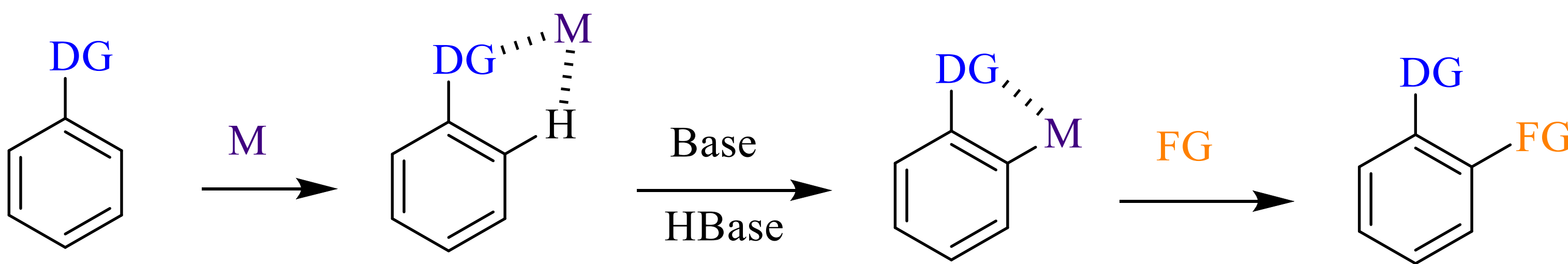


Aplicaciones



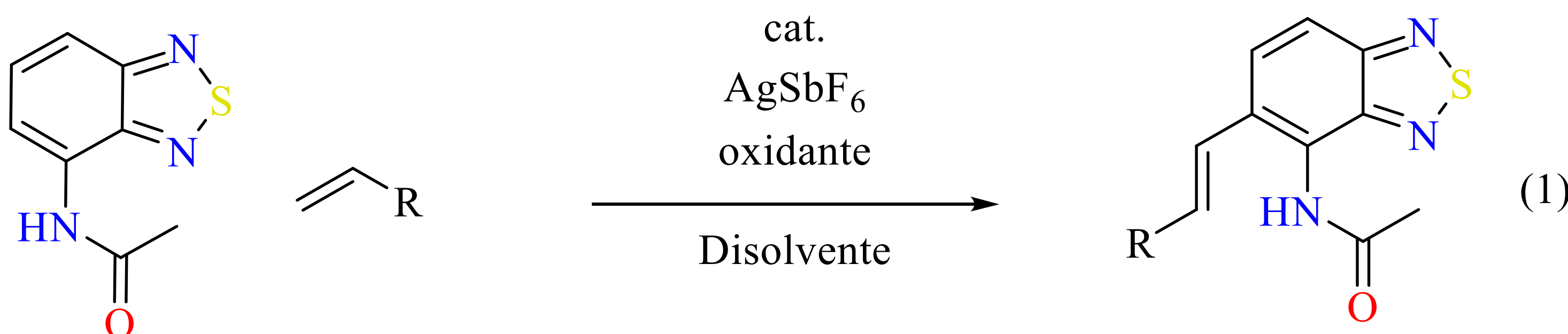
Espectro ¹H RMN del compuesto 2 (500 MHz, CDCl₃)

Activación C-H



Objetivo General

Desarrollar una metodología sintética para la alquenilación regioselectiva en la posición 5 del 4-acetamidobenzotriazol (BTD) a través de la activación del enlace C – H catalizada por rodio-III (ec. 1).



Resultados

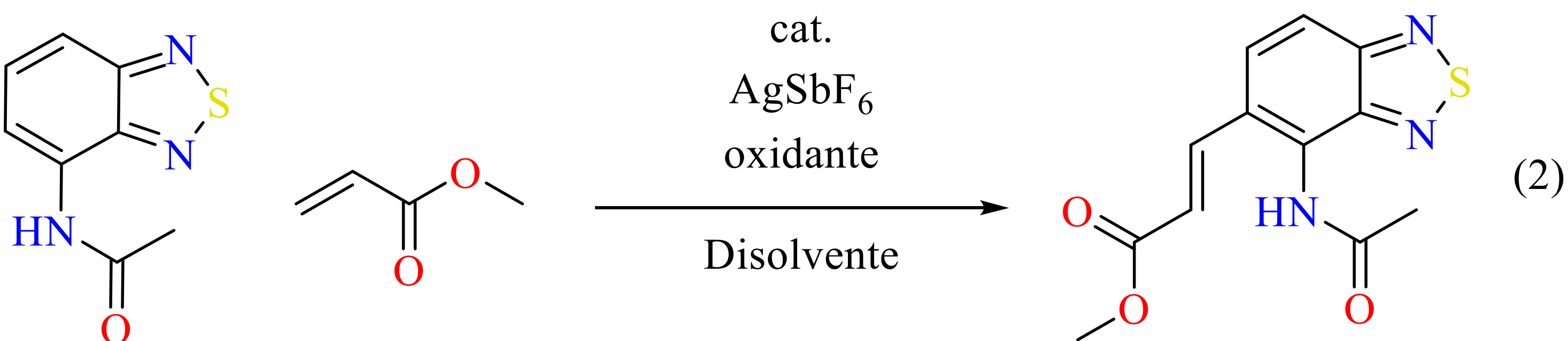


Tabla de Optimización de la reacción (ec. 2).

Entrada	Acrilato de Metilo	Catalizador	Ligante	Oxidante	Disolvente	Temperatura	Tiempo	Atm	Conversión (%)
1	5 equiv	[Cp*RhCl ₂] ₂	AgSbF ₆	AgOAc	1,2-DCE	80 °C	3 h	N ₂	85%
2	5 equiv	[Cp*RhCl ₂] ₂	AgSbF ₆	Cu(OAc) ₂	1,2-DCE	80 °C	3 h	N ₂	<2%
3	5 equiv	[Cp*RhCl ₂] ₂	AgSbF ₆	Ag ₂ CO ₃	1,2-DCE	80 °C	3 h	N ₂	25%
4	5 equiv	[Cp*RhCl ₂] ₂	AgSbF ₆	Ag ₂ O	1,2-DCE	80 °C	3 h	N ₂	16%
5	5 equiv	[Cp*RhCl ₂] ₂	AgSbF ₆	K ₂ S ₂ O ₃	1,2-DCE	80 °C	3 h	N ₂	<2%
6	5 equiv	[Cp*RhCl ₂] ₂	AgSbF ₆	AgOAc	Dioxano	80 °C	3 h	N ₂	4%
7	5 equiv	[Cp*RhCl ₂] ₂	AgSbF ₆	AgOAc	DMF	80 °C	3 h	N ₂	4%
8	5 equiv	[Cp*RhCl ₂] ₂	AgSbF ₆	AgOAc	THF	80 °C	3 h	N ₂	64%
9	5 equiv	Pd(OAc) ₂	AgSbF ₆	AgOAc	1,2-DCE	80 °C	3 h	N ₂	10%

Conclusiones parciales

- Hasta el momento, se ha realizado un estudio de condiciones de reacción para llevar a cabo la alquenilación regioselectiva del 4-acetamidobenzotriazol en la posición 5. Con estos resultados, se ha logrado incorporar el acrilato de metilo (BTD 2) con un 82% de rendimiento.
- Actualmente nos encontramos desarrollando el estudio de alcances y limitaciones de esta nueva metodología.

Agradecimientos

Agradecemos a la Universidad de Guanajuato y CONAHCYT por otorgarnos los medios necesarios para la realización del proyecto. Agradecemos a la Dra. Diana Estephany Ramírez Ornelas y a mi compañero Alexis Sebastián Zamora Vázquez por apoyarnos dentro del laboratorio de Materiales Funcionales.

Referencias

- Neto, B. A. D., Correa, J. R. & Spencer, J. *Chem. Eur. J.* **2021**, 28, DOI: 10.1002/chem.202103262
- Mocanu, T., Plyuta, N., Cauchy, T., Andruh, M. & Avarvari, N. *Chemistry*. **2021**, 3, 269–287.
- Khisamov, R., Sukhikh, T., Bashirov, D., Ryadun, A. & Konchenko, S. *Molecules*. **2020**, 25, 2428.
- Wang, D. Yu, X., Xu, X., Ge, B., Wang, X., Zhang, Y. *Chem. Eur. J.* **2016**, 22, 8663–8668.