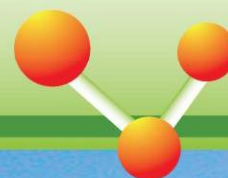


# PRESENTACIÓN



## 9<sup>a</sup> Reunión de la Academia Mexicana de Química Orgánica



22 al 26 de abril de *2013*  
*Boca del Río, Veracruz*



- 023** Roberto Nolla Saltiel, Susana Porcel García **Reacciones de acetilación promovidas por AgOAc**
- 024** Jovana Pérez Pérez, Imelda Pérez Pérez, Emilio De la Cerda Pedro, Heraclio López Ruiz, Susana Rojas Lima **Funcionalización de 2-arilbenzoxazoles con 1,2,3-triazoles vía reacción de tipo Click**
- 025** Audifás Salvador Matus Meza, Francisco Hernández Luis **Síntesis y caracterización espectroscópica de derivados de la 4-metoxiacetofenona**
- 026** Alejandro Cervantes Reyes, David Corona Becerril, Erick Cuevas Yañez **Nuevos compuestos organocuprosos en la síntesis de 1-Sulfonil-1,2,3-Triazoles a través de CuAAC**
- 027** Sofía Karina Cruz Macay, Pablo Aguilar Herrera, Marco Sánchez Ramírez, Delia Hernández Romero, Esmeralda Sánchez Pavón, José Ma. Rivera Villanueva **Síntesis de azoles concatenados**
- 028** Juan Manuel Junior Cervera Villanueva, Mario Ordóñez Palacios. **Síntesis de aminofosfonatos conformacionalmente restringidos**
- 029** J. E. de la Cerda Pedro, M. Cortes Hernández, H. López Ruiz, S. Rojas Lima. **Síntesis de 1,2,3-triazoles mediante reducción de CuSO<sub>4</sub> utilizando PhB(OH)<sub>2</sub> como agente reductor**
- 030** Paulette Vincent Ruz, García González Ma. C, Miranda Luis D. **Síntesis de Deshidroalaninas para el estudio de reacciones en cascada catalizadas por Paladio**
- 031** Miguel Ángel Crisóstomo Mendoza, Hugo Alejandro Jiménez Vázquez **Análisis de la diastereoselectividad de algunas reacciones de adición nucleofílica a aldehídos por métodos computacionales**
- 032** Erik Andrade Jorge, José G. Trujillo Ferrara **Nuevas isoindolinas con posible interacción sobre el  $\alpha$ -adrenérgico estudio *in silico***
- 033** Lizbeth Chávez A., Luis D. Miranda G **Síntesis de macrociclos mediante una secuencia UGI-CLICK**
- 034** Alejandra Domínguez Huerta, Gabriela Huelgas Saavedra, Haydee Rojas Cabrera, Cecilia Anaya Berríos **Síntesis de una nueva prolinamidotiourea y su aplicación como organocatalizador en la reacción de Michael**
- 035** Sandybel Salgado Barrera, Francisco Hernández Luis **Preparación de una molécula diseñada para el tratamiento de enfermedades parasitarias desatendidas**
- 036** Judith Güemes Quinto, Gabriel Navarrete Vázquez **Diseño y síntesis de dos derivados bencimidazólicos como posibles inhibidores de la enzima xantina-oxidasa**

# Síntesis de 1,2,3-triazoles mediante reducción de $\text{CuSO}_4$ utilizando $\text{PhB(OH)}_2$ como agente reductor.

J.E. de la Cerda Pedro, M. Cortes Hernández, H. López Ruiz, S. Rojas Lima.

Centro de Investigaciones Químicas. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Área Académica de Química. Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5, Ciudad del Conocimiento, C.P. 42183, Mineral de la Reforma, Hidalgo.

E-mail: [heraclio@uaeh.edu.mx](mailto:heraclio@uaeh.edu.mx), [jdelacerdapedro@gmail.com](mailto:jdelacerdapedro@gmail.com)

**Palabras clave:** Triazoles, Sulfato Cúprico, Ácido fenilborónico.

## Introducción

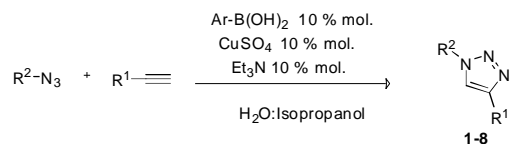
Desde los primeros estudios sobre la síntesis catalítica de 1,2,3-triazoles funcionalizados ha resultado evidente que el catalizador se basa en una especie de cobre en estado de oxidación 1+.

De los tres estados de oxidación de este metal (0, 1+ y 2+), el ión cuproso (1+) es el menos estable debido a que se oxida fácilmente<sup>1</sup> en presencia de aire a  $\text{Cu}^{2+}$  o se dismuta a  $\text{Cu}^0$  y  $\text{Cu}^{2+}$ . Sin embargo, la oxidación de  $\text{Cu}^0$  a  $\text{Cu}^{1+}$  y la reducción de  $\text{Cu}^{2+}$  a  $\text{Cu}^{1+}$  pueden llevarse a cabo mediante procedimientos sencillos. De esta forma se han descrito distintos métodos para generar la especie catalítica; los más usuales se basan en: (1) La reducción *in situ* de sales de  $\text{Cu(II)}$  mediante el uso de ascorbato de sodio u otros agentes reductores, (2) la oxidación del cobre metálico con un oxidante suave o dismutación de  $\text{Cu}^{1+}$  y (3) la adición directa de un complejo de  $\text{Cu(I)}$ .<sup>2</sup>

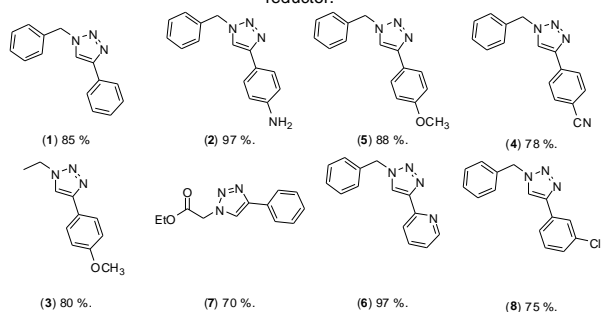
## Resultados y discusión

En la literatura se ha descrito que el ácido fenilborónico es susceptible a sufrir oxidaciones,<sup>3</sup> con base en estos antecedentes y debido a que en nuestro grupo de investigación estamos en búsqueda de metodologías nuevas en química orgánica. Decidimos evaluar la capacidad del ácido fenilborónico como agente reductor del  $\text{CuSO}_4$  en la síntesis de 1,2,3-triazoles, por lo tanto se llevó a cabo una serie de experimentos utilizando como materia prima la bencilazida y fenilacetileno en presencia de Ácido fenilborónico,  $\text{CuSO}_4$  y  $\text{Et}_3\text{N}$  como catalizadores, empleando diferentes disolventes, observando que al utilizar una mezcla de  $\text{PrOH-H}_2\text{O}$  (1:1), 10 % mol de Ácido fenilborónico, 10 % mol de  $\text{CuSO}_4$  y 10 % mol de  $\text{Et}_3\text{N}$  se obtiene el compuesto deseado con un rendimiento del 85 %. Con las condiciones óptimas encontradas, estas se aplicaron a la síntesis de los diferentes triazoles obteniendo rendimientos del 70 al 97 %.

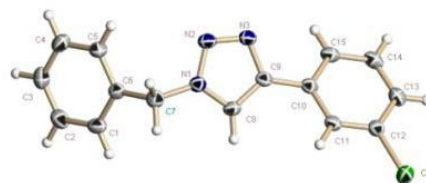
En la actualidad se está investigando cual es el mecanismo responsable de la reducción de  $\text{Cu(II)}$  a  $\text{Cu(I)}$  que permite la preparación de los triazoles de forma altamente regioselectiva (Esquema 1).



**Esquema 1.** Síntesis de triazoles utilizando  $\text{Ar-B(OH)}_2$  como agente reductor.



Todos los compuestos fueron caracterizados por RMN de  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  y espectros bidimensionales. Para el compuesto **8** se logro obtener cristales adecuados para el estudio mediante difracción de Rayos-X de monocristal con lo cual fue posible confirmar la formación del regioisómero 1,4 exclusivamente (Figura 1).



**Figura 1.** Estructura de Rayos X del compuesto **8**.

## Conclusiones

Se desarrolló un método eficiente para la síntesis de los 1,2,3-triazoles-1,4-disustituídos en presencia de  $\text{CuSO}_4$  y  $\text{PhB(OH)}_2$  como agente reductor, obteniendo buenos rendimientos químicos a partir de distintas azidas y alquinos terminales.

## Referencias

- Diaz-Diaz, D.; Punna, S.; Holzer, P.; McPherson, A. K.; Sharpless, K. B.; Fokin, V. V.; Finn, M. G. *J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.* **2004**, *42*, 4392-4403.
- Diaz-Diaz, D.; Finn, M. G.; Sharpless, K. B.; Fokin, V. V.; Hawker, C. J. *An. Quim.* **2008**, *104(3)*, 173-180.
- Xu, J.; Wang, Shao, C.; Su, D.; Cheng, G.; Hu, Y. *Org. Lett.* **2010**, *12*, 1964-1967.