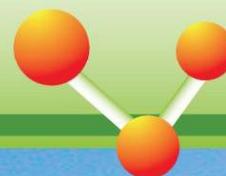


PRESENTACIÓN



9^a Reunión de la Academia Mexicana de Química Orgánica



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



Síntesis de nuevos 2,6-bis(benzoxazol-2-il)-4-(*tert*-butil)fenol con propiedades fluorescentes.

Horacio Briseño-Ortega, Susana Rojas Lima, Heraclio López Ruiz.

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. lima@uaeh.edu.mx, horganichem@gmail.com.

Palabras clave: 2,6-bis(benzoxazol-2-il)-4-(*tert*-butil)fenol, fluorescencia.

Introducción

Los benzoxazoles son compuestos heterocíclicos que se encuentran en productos naturales o se pueden obtener de forma sintética. A esta familia pertenecen sustancias que presentan propiedades antivirales, antibacteriales o como herbicidas.¹ Un ejemplo es el **UK-1**, este es un metabolito antitumoral producido por la cepa 517-02 de la *Streptomyces sp.*, que muestra actividad citotóxica moderada contra células B16, HeLa y P338.^{1a} Adicionalmente a estas propiedades biológicas los benzoxazoles exhiben la propiedad de fototautomerización, la cual es un proceso de transferencia de protón intramolecular en estado excitado (ESIPT).² La fotoexcitación conduce a un cambio en la densidad electrónica que facilita la migración de protones de un átomo donador,



UK-1

Figura 1. Estructura del **UK-1**.

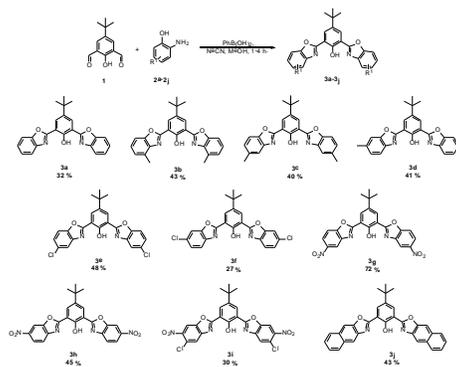
Continuando con la búsqueda de novedosos compuestos luminiscentes, en este trabajo se llevó a cabo la síntesis de 10 nuevos 2,6-bis(benzoxazol-2-il)-4-(*tert*-butil)fenol **3a-3j** a partir de 1 equiv. de 4-*tert*-butil-2,6-diformilfenol (**1**) con 2 equiv. de los *o*-aminofenoles **2a-2j**, 20 % de ácido fenilborónico y 2 equiv. de NaCN³ en metanol, con tiempos de reacción de 1-4 h.³

Las reacciones fueron monitoreadas mediante cromatografía en placa fina hasta observar la desaparición del reactivo limitante. Los nuevos 2,6-bis(benzoxazol-2-il)-4-(*tert*-butil)fenol precipitaron en el medio de reacción y fueron purificados mediante filtración con metanol frío obteniendo los compuestos como sólidos coloridos con rendimientos moderados (Esquema 1).

Los compuestos **3a-3j** fueron caracterizados mediante técnicas espectroscópicas de RMN, ¹H y ¹³C, IR y análisis elemental.

normalmente oxígeno, a un átomo aceptor cercano, oxígeno o nitrógeno, culminando en el proceso ESIPT.

Resultados y discusión



Esquema 1. Síntesis de 2,6-bis(benzoxazol-2-il)-4-(*tert*-butil)fenol **3a-3j**.

En el espectro de ¹H los compuestos presentan una señal simple con desplazamiento de 13.19-11.16 ppm asignada al protón del grupo hidroxilo, además se observa solo la mitad de señales debido a que la molécula es simétrica. Cabe mencionar que los 2,6-bis(benzoxazol-2-il)-4-(*tert*-butil)fenol **3a-3d**, **3f** y **3j** presentan fluorescencia en estado sólido (Figura 2).



Figura 2. 2,6-bis(benzoxazol-2-il)-4-(*tert*-butil)fenol **3a-3j** en estado sólido expuestos a la luz UV.

Conclusiones

En conclusión, se sintetizaron 10 nuevos 2,6-bis(benzoxazol-2-il)-4-(*tert*-butil)fenol que presentan en su estructura grupos electro-donadores y electro-atradores. Así mismo, estos compuestos novedosos pueden ser aplicados como dispositivos orgánicos electroluminiscentes, dispositivos termocrómicos o como sensores fluorescentes.

Referencias

- (a) Deluca, M. R.; Kervin, S. M. *Tetrahedron Lett.* **1997**, 38, 199-202. b) Sato, Y.; Yamada, M.; Yoshida, S.; Soneda, T.; Ishikawa, M.; Nizato, T.; Suzuli, K.; Konno, F. *J. Med. Chem.* **1998**, 41, 3015-3021.
- (a) Pang, Y.; Chen, W. H. *Tetrahedron Lett.*, **2009**, 50, 6680-6683. (b) Kanda, T.; Momotake, A.; Shinohara, Y.; Sato, T.; Nishimura, Y.; Arai, T. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2009**, 82, 118-120.
- López-Ruiz, H.; Briseño-Ortega, H.; Rojas-Lima, S.; Santillán, R. L.; Farfán, N. *Tetrahedron Lett.* **2011**, 52, 4308-4312.