

Estudio teórico de reacciones transmisivas Diels-Alder para la formación de moléculas complejas

Edgar E. Flores-Fraire,^{a, b} Said Jalife,^b Gerardo Martínez-Guajardo,^a Gabriel Merino.^b

^aUnidad Académica de Ciencias Químicas, Área de Ciencias de la Salud, Universidad Autónoma de Zacatecas, Km. 6 carretera Zacatecas-Guadalajara s/n, Ejido La Escondida C.P. 98160, Zacatecas, Zacatecas, México.

^bDepartamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida, Km 6 Antigua Carretera a Progreso. Apdo. Postal 73, Cordemex, 97310 Mérida, Yucatán, México.

esau9302@hotmail.com

En 2014, Fallon y colaboradores reportaron una cascada de reacciones aprovechando transformaciones tipo Diels-Alder.¹ A esta serie de reacciones se les denomina como transmisivas y son capaces de generar productos de mayor complejidad estructural y química a lo largo de cada paso de reacción (ver figura 1).^{2,3}

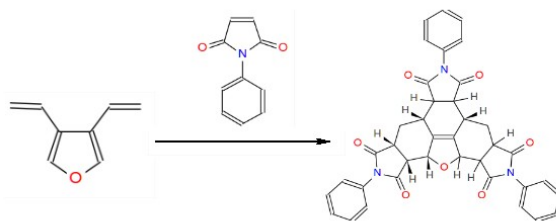


Figura 1. Reacción transmisiva Diels-Alder entre el 3,4-divinilfuran con N-fenilmaleimida.

Este trabajo explora sistemáticamente las múltiples rutas de reacción para la formación de furanodendralenos involucrados en reacciones transmisivas Diels-Alder, utilizando teoría de los funcionales de la densidad (PBE0-D3/def2-TZVP) y evaluando los efectos de la dispersión y solvente a lo largo de los diferentes caminos de reacción, nuestros resultados muestran que las barreras de reacción no sobrepasan las 30 kcal/mol y que es necesario incluir los efectos de dispersión y de disolvente para describir correctamente las reacciones.

- 1) Fallon, T.; Willis, A.; Paddon-Row, M.; Sherburn, M. J. *Org. Chem.*, 2014, 79, 3185-3193.
- 2) Diels, O.; Alder, K. *Eur. J. Org. Chem.* 1928, 460, 98-122.
- 3) Tan, S. M.; Willis, A.; Paddon-Row, M.; Sherburn, M.. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, 55, 3081-3085.