

MECANISMO DE REACCIÓN PARA LA SÍNTESIS DE PIRROLO[3,4- B]PIRIDIN-5-ONAS

Ángel Rentería Gómez¹, Alejandro Islas Jácome¹, José Oscar Carlos Jiménez Halla¹,
María del Rocío Gámez Montaña¹

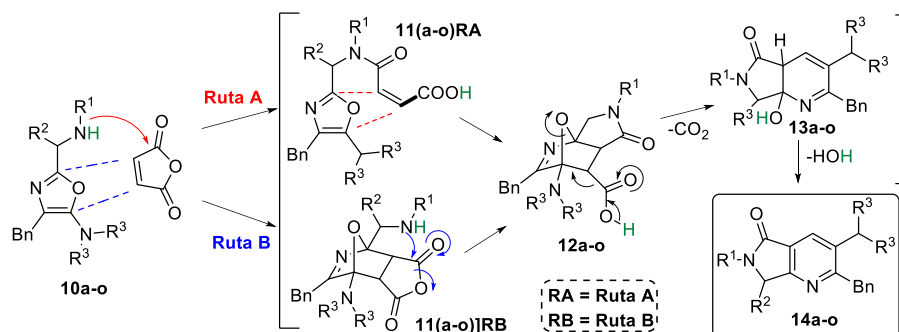
¹División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Química, Universidad de
Guanajuato, Guanajuato

E-mail: angellegnarenteria@gmail.com, jjimenez@ugto.mx, rociogm@ugto.mx

Como parte de nuestro programa de síntesis de compuestos híbridos con sistemas heterocíclicos de interés en química medicinal, reportamos varias metodologías basadas en reacciones de multicomponentes para acceder a nuevas pirrolo[3,4-b] piridin-5-onas ligadas o fusionadas con heterociclos de interés en química medicinal.¹

En base a los reportes que describen la síntesis de pirrolo[3,4-b]piridin-5-onas a partir de 5-aminoxazoles y anhídrido maleico,² se proponen los mecanismos de reacción del biciclo que contiene el anillo de oxazol como intermediario en común, resultado de la cicloadición tipo aza Diels-Alder (Esquema 1).

Con el fin de investigar la ruta cinética y termodinámicamente favorecida, se realizó un estudio computacional usando DFT a nivel M06-2X/6-311+G(d) implementado en Gaussian09.



Esquema 1. Posibles rutas para acceder a las pirrolo[3,4-b]piridin-5-onas.

Los cálculos sugieren que la naturaleza del sustituyente en el 5-aminoxindol juega un papel decisivo en el curso de la reacción. Existe una ruta de reacción selectiva en la construcción de la pirrolo[3,4-b]piridin-5-ona a partir de un 5-aminoxazol y anhídrido maleico.

¹ Wilson, R. M.; Danishefsky, S. J. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, 49, 6032.

² Gámez-Montaña, R.; Zhu, J. *Chem. Commun.* **2002**, 2448.