

ESTUDIO DEL MECANISMO DE REACCIÓN PARA LA OBTENCIÓN DE TETRAZOL ISOINDOLONAS

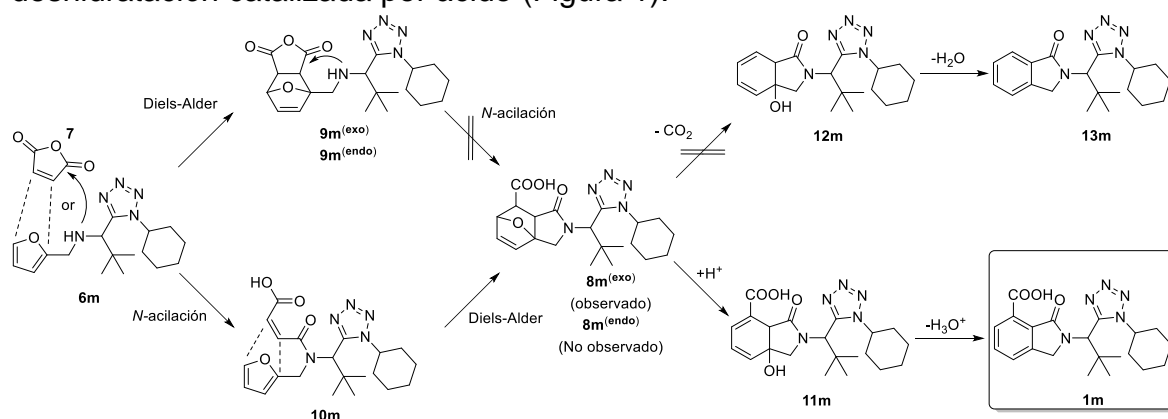
Ángel Rentería Gómez¹, Alejandro Islas Jácome¹, José Oscar Carlos Jiménez Halla¹,
María del Rocío Gámez Montaña¹

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

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

La reacción entre el anhídrido maleico y los derivados de aminoazoxol ha permitido la síntesis de pirrolopiridinonas en nuestro grupo de investigación.¹ Recientemente, hemos reportado el estudio del mecanismo de reacción que involucra los procesos de Diels-Alder/*N*-acilación/descaboxilación/deshidratación.² El funcional M06-2X³ ha sido reportado como un método bastante confiable para predecir energías de activación en cicloadiciones⁴ y por eso lo hemos seleccionado para nuestro estudio computacional. En el presente trabajo se muestra el estudio computacional usando DFT para determinar el mecanismo más probable para obtener derivados de tetrazolisoindolonas. Para ello se hicieron cálculos en Gaussian 09 acorde a la siguiente metodología: PCM (tolueno)-M06-2X/6-311+G(d)//M06-2X-D3/6-31G(d).

Una vez analizadas las barreras de energía y las energías relativas de los posibles intermediarios, se concluye que el mecanismo más probable para la obtención de tetrazolisoindolonas es a través de los procesos *N*-acilación/Diels-Alder *exo*/deshidratación catalizada por ácido (Figura 1).



¹Islas-Jácome, A.; González-Zamora, E.; Gámez-Montaña, R. *Tetrahedron Lett.* **2011**, *52*, 5245.

²Islas-Jácome, A.; Rentería-Gómez, A.; Rentería-Gómez, M.A.; González-Zamora, E.; Jiménez-Halla, J.O.C.; Gámez-Montaña, R. *Tetrahedron Lett.* **2016**, *57*, 3496.

³Zhao, Y.; Truhlar, D. G. *Acc. Chem. Res.* **2008**, *41*, 157.

⁴Pieniazek, S. N.; Clemente, F. R.; Houk, K. N. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2008**, *47*, 7746.