

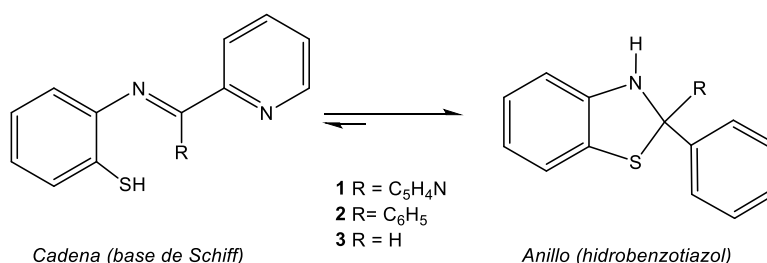
Estudio del equilibrio de cadena-anillo en 2-piridin hidrobentotiazoles sustituidos

Jesús Alberto Alvarez-Hernández, Noemí Andrade-López, Julián Cruz-Borbolla, José Guadalupe Alvarado-Rodríguez.

Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Área Académica de Química. Carretera Pachuca-Tulancingo, km. 4.5. Col. Carboneras, Mineral de la Reforma, Hgo. C.P. 42076, México.
jaah_1988@hotmail.com

Los compuestos heterocíclicos por sus características estructurales han sido utilizados en catálisis para la formación de nuevos compuestos de interés industrial, en la elaboración de productos farmacéuticos y en estudios de fotoluminiscencia, entre otros.¹ Respecto a los compuestos heterocíclicos como los derivados hidrobentotiazólicos, éstos son usados como precursores para la formación de iminas coordinadas a metales, las cuales no es posible obtener por reacciones condensación.² Con respecto a su estructura, se ha descrito que los hidrobentotiazoles en solución, pueden presentar el equilibrio de cadena (base de Schiff) -anillo (hidrobentotiazol) y que el efecto de los sustituyentes en el anillo hidrobentotiazólico puede modificar la observación del tautómero predominante.^{3, 4, 5}

Con base en los antecedentes, en este trabajo se describe el estudio estructural utilizando cálculos DFT con el funcional de intercambio y de correlación B3LYP y la base orbital 6-311+G**, en solución por RMN de ¹H y en estado sólido por difracción de rayos X de monocristal para los hidrobentotiazoles **L**¹ – **L**³ [R = C₅H₄N (**L**¹); R = C₆H₅ (**L**²) y R = H (**L**³)], con la finalidad de evaluar la influencia del sustituyente en el equilibrio de cadena-anillo. Los datos obtenidos por DFT muestran el predominio de la forma de anillo en los derivados **L**¹ – **L**³ y son acordes con los datos experimentales, esquema 1.



Esquema 1. Equilibrio de cadena - anillo en los derivados **1** – **3**.

Referencias

- ¹ Carlson L. J., Welby J., Zebrowski K. A., Wilk M. M., Giroux R., Ciancio N., Tanski J. M., Bradley A., Tyler L. A. *Inorg. Chim. Acta.* 2011, **365**, 159–166.
- ² Gaumont A. C., Gulea M., Levillain J. *Chem. Rev.* 2009, **109**, 1371–1401.
- ³ Mahajan K., Swami M., Singh R. V. *Russ. J. Coord. Chem.*, 2009, **35**, 179–185.
- ⁴ Bouwman E., Henderson R. K., Powell A. K., Reedijk J., Smeets W. J. J., Spek A. L., Veldman N., Wocadlo S. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 1998 3495–3500.
- ⁵ Podányi B., Hermez I., Horváth A. *J. Org. Chem.* 1986, **51**, 2988–2994.