

## ESTUDIO TEÓRICO DEL MECANISMO DE REACCIÓN DE DOBLE FUNCIONALIZACIÓN SELECTIVA C-H DE AMINAS CÍCLICAS

Isaías Morales Salazar, Urbano Osorio,  
Jacinto Sandoval Lira, Fernando Sartillo Piscil, Julio M. Hernández Pérez.  
Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. Av.14 Sur Esq.  
San Claudio, Col. San Manuel 72570, Puebla; México  
[isaiasms117@gmail.com](mailto:isaiasms117@gmail.com)

Recientemente nuestro grupo de investigación ha desarrollado un método directo para preparar 3-alcoxi-amino lactamas a partir de aminas cíclicas usando  $\text{NaClO}_2$  /TEMPO/ $\text{NaClO}$ . Este método involucra una doble funcionalización selectiva de las posiciones  $\text{C}_\alpha\text{-H}$  y  $\text{C}_\beta\text{-H}$  de aminas cíclicas a través de un nuevo proceso tándem. En este trabajo estudiamos el mecanismo de reacción en el contexto de la teoría de funcionales de la densidad a nivel de teoría M06/cc-pVDZ. Los resultados muestran que el curso de la reacción involucra tres etapas: (i) el catión oxamonio (A), obtenido de la oxidación del radical TEMPO reacciona con la amina cíclica (B), generando el intermediario ión amonio (C) el cual se isomeriza a la enamina (D). (ii) La reacción de la enamina (D) con el catión oxamonio (A) permite la incorporación del TEMPO formando el ión amonio (E); en esta etapa se reporta el análisis de NBO donde la energía de deslocalización ( $E_2$ ), evidencia la importancia de la deslocalización electrónica. (iii) El ión amonio (E) reacciona con el ión clorito para la formación de (F) y la posterior eliminación de  $\text{HClO}$  genera la correspondiente 3-alcoxi-amino lactama. Cada intermediario y estado de transición fue caracterizado a partir del cálculo de frecuencias y su conexión se garantiza a partir del cálculo de IRC.

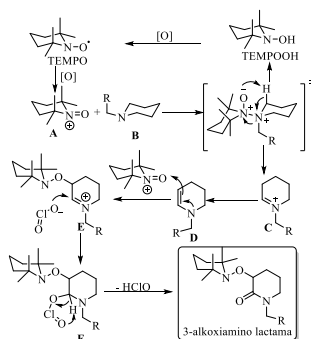


Figura 1. Mecanismo de reacción propuesto.

Osorio, U.; Quintero, L.; Chamorro, A. D.; Höpfl, H.; Sartillo, F. Transition metal-free selective double C-H oxidation at the alpha and beta position of cyclic amines to 3-alkoxyamine lactams. *Sometido a J. Org. Chem* **2016**.