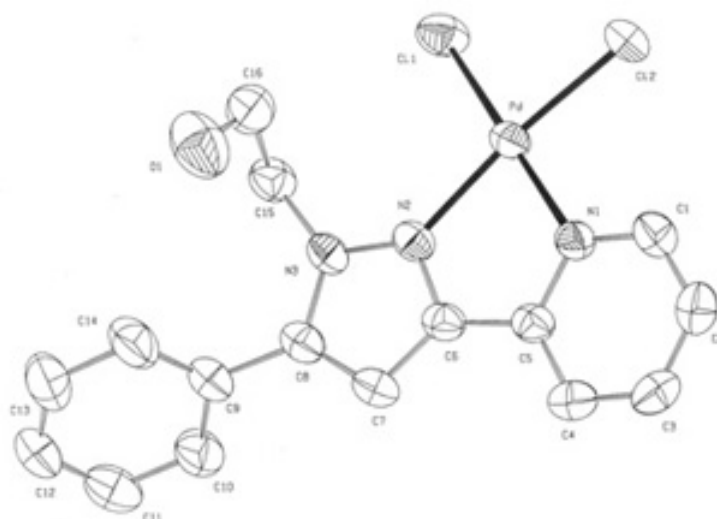


07/2008

Análisis de moléculas muy efectivas para mejorar la síntesis orgánica



A través de técnicas experimentales e informáticas, los autores de este trabajo analizaron la efectividad de algunos grupos de moléculas, derivados de compuestos de pirazol, usadas como precatalizadores en los procesos de síntesis orgánica realizados mediante la Reacción de Heck.

Algunos complejos con fórmula $[PdCl_2(L)]$, donde L es un ligando piridilpirazol (Figura 1), se han utilizado como pre-catalizadores en la reacción de Heck entre haluros de fenilo y acrilato de tert-butilo. La reacción de Heck es una de las que más usa complejos de Pd(II) como catalizadores en síntesis orgánica [i, ii, iii]. En este estudio se usan ligandos pirazólicos con diferentes sustituciones en posición N1 del anillo de pirazol.

La síntesis y caracterización de algunos ligandos derivados del pirazol con diferentes sustituciones en las posiciones 3, 5 del anillo pirazólico han sido descritos en la literatura [iv, v, vi], y las reacciones de algunos de estos ligandos con Pd(II) han sido estudiadas en nuestro laboratorio [vii, viii, ix].

El problema más común en la Química de Coordinación de los ligandos piridilpirazol y su coordinación a iones metálicos es la baja solubilidad de estos complejos en disolventes orgánicos. La solubilidad aumenta si se incorporan grupos alquilo o hidroxialquilo en la posición N1 del anillo pirazólico.

En artículos recientemente publicados, hemos descrito la síntesis y caracterización de algunos ligandos derivados del N-alquilo-3,5-pirazol, con grupos etil, octil y hidroxietil en la posición N1 del anillo pirazólico, y además hemos estudiado su reactividad frente a Pd(II). Los mejores resultados se han obtenido cuando el sustituyente contiene un grupo hidroxil (Figura 2) y los complejos correspondientes dan muy buenos resultados como catalizadores en la reacción de Heck con clorobenceno como haluro aromático.

Estudios teóricos han confirmado que la presencia de un grupo OH en el sustituyente de N1 favorece la disociación del enlace Pd-X, ya que estabiliza el complejo catiónico y se favorece termodinámicamente el proceso en ausencia de moléculas de disolvente coordinadas.

Figura 2. Los mejores resultados se han obtenido cuando el sustituyente contiene un grupo hidroxil

Vanessa Montoya (a), Josefina Pons (a)*, Vicenç Branchadell (b), Jordi García-Antón (a), Xavier Solans (c), Mercè Font-Bardia (c) and Josep Ros (a)

a) Departament de Química, Unitat de Química Inorgànica, Universitat Autònoma de Barcelona, E-08193-Bellaterra, Cerdanyola, Spain

b) Departament de Química, Unitat de Química Física, Universitat Autònoma de Barcelona, E-08193-Bellaterra, Cerdanyola, Spain

c) Departament de Cristal·lografia, Mineralogia i Diposits Minerals, Universitat de Barcelona, Martí i Franquès s/n, 08028-Barcelona, Spain.

Universitat Autònoma de Barcelona

josefina.pons@uab.es

Referencias

"Highly efficient pyridylpyrazole ligands for the heck reaction. A combined experimental and computational study". Montoya, Vanessa; Pons, Josefina; Branchadell, Vicenc; Garcia-Anton, Jordi; Solans, Xavier; Font-Bardia, Merce; Ros, Josep. ORGANOMETALLICS, 27 (6): 1084-1091 MAR 24 2008.

[View low-bandwidth version](#)