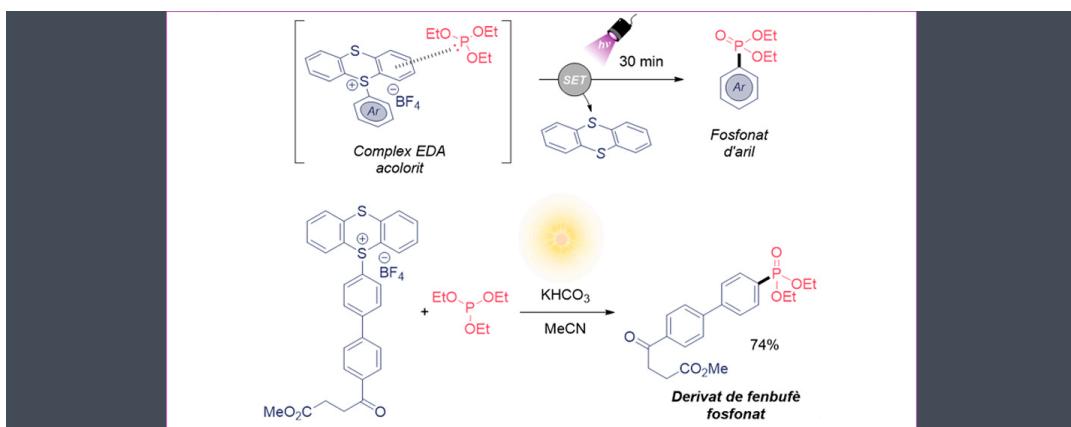


Divulga UAB

Revista de difusió de la recerca de la
Universitat Autònoma de Barcelona

15/10/2024

Método basado en el uso de luz visible para la preparación de fosfonatos de interés en medicina y agricultura



El grupo CatSyNanoMat del Departamento de Química de la UAB ha diseñado un nuevo método sintético, práctico y eficiente para la preparación de fosfonatos de arilo, unos compuestos orgánicos que se usan en los ámbitos agrario y de ciencias de la salud. Destaca su sencillez por la ausencia de catalizadores. La posibilidad de emplear la luz solar como fuente de energía lo sitúa dentro del campo de la química verde.

Actualmente, los procesos de oxidación y reducción (redox) que suceden gracias a la luz visible (conocidos como catálisis fotoredox) representan una gran herramienta para el desarrollo de nuevos métodos sintéticos. Estos procesos suelen producir especies radicalarias (especies con un electrón libre) mediante etapas de transferencia de un electrón (SET). Históricamente, la catálisis fotoredox utiliza complejos metálicos de rutenio o iridio como photocatalizadores, que tienen la capacidad de absorber energía lumínica para, posteriormente, producir procesos SET que abren camino a una nueva reactividad. A pesar de la eficiencia de estos photocatalizadores, es deseable evitarlos dado su elevado coste. Una estrategia interesante que está en auge y que evita el uso de catalizadores es la combinación de una molécula aceptora de electrones con una donadora. En estos casos, ambas moléculas forman un nuevo agregado llamado complejo dador-aceptor de electrones

(EDA), que típicamente presenta coloración y está dotado de propiedades redox y espectroscópicas muy específicas. Hay que destacar que estos complejos pueden absorber la luz visible y activar procesos SET que permiten la generación de especies radicalarias.

Unos compuestos con creciente interés y que han demostrado ser buenas especies aceptoras de electrones en estrategias EDA son las llamadas sales de aril tian trenio. Estas sales están formadas por un anillo de benceno unido al átomo de azufre de la unidad de tian trenio (parte catiónica) y un contraión, típicamente tetrafluoroborato (BF_4^-).

Por otro lado, los fosfonatos de arilo son muy interesantes dentro de la química medicinal y agraria, por eso nuestro grupo de investigación planteó utilizar las sales de tian trenio (aceptores) junto con fosfito de trietilo ($\text{P}(\text{OEt})_3$, dador) para la formación de un nuevo EDA (ver Figura), que en última instancia permite la formación de fosfonatos de arilo utilizando luz visible. Un hecho alentador es que al combinar ambos reactivos observamos que la disolución presenta coloración.

El proceso de optimización permitió obtener el fosfonato de arilo deseado con un rendimiento excelente utilizando bicarbonato de potasio en acetonitrilo y bajo irradiación de un LED de 390 nm durante sólo 30 minutos. Esta metodología se ha podido aplicar a un gran número de sustratos, entre los que destacamos anillos aromáticos ricos y pobres en electrones, así como moléculas derivadas de otras biológicamente activas como el antiinflamatorio Fenbufeno. Señalar que este método también funciona perfectamente utilizando la luz solar, ya que obtuvimos el producto deseado en un 74% de rendimiento (ver Figura).

En conjunto, en el grupo de investigación hemos desarrollado un método sintético práctico y eficiente para la preparación de fosfonatos de arilo. Hemos demostrado la formación de un nuevo complejo EDA basado en sales de arilo tian trenio y fosfitos. Por último, este método podría servir como una herramienta eficiente para la fosfonación de biomoléculas.

Albert Granados; Albert Gallego-Gamo; Carolina Gimbert-Suriñach; Adelina Vallribera
Departamento de Química
Universitat Autònoma de Barcelona
Albert.Granados@uab.cat

Referencias

Gallego-Gamo Albert, Reyes-Mesa David, Guinart-Guillem Axel, Pleixats Roser, Gimbert-Suriñach Carolina, Vallribera Adelina, Granados Albert. **Site-selective and metal-free C–H phosphonation of arenes via photoactivation of thianthrenium salts**. 2023. *RSC Advances*. <http://dx.doi.org/10.1039/D3RA04512A>

[View low-bandwidth version](#)