



## REACCIONES DE HIDROLISIS DE BENZOTIAZOL-S-METILISOTIOUREAS DERIVADAS DE $\alpha$ -AMINOÁCIDOS

ALEJANDRO CRUZ<sup>1</sup>, María Esther Bautista-Ramírez<sup>2</sup> y Itzia Irene Padilla-Martínez<sup>2</sup>

1 Instituto Politécnico Nacional-UPIBI, 2 Instituto Politécnico Nacional- UPIBI. alcralmx@hotmail.com

### Introducción

Actualmente el Metabenzotiazuron (MBTU)), una urea derivada del benzotiazol se usa como herbicida en el cultivo de maíz y es un ingrediente activo de dos fórmulas comerciales, Tribunil y Ormet. En este sentido, se propuso la síntesis de ureas derivadas del benzotiazol y aminoácidos por hidrólisis de los carboxilatos de las benzotiazolil-SMeisotioureas **3**.

### Metodología

Los benzotiazol-SMeisotiourea carboxilatos de sodio **3** derivados del benzotiazol **1** se hicieron reaccionar con agua o con soluciones de hidróxido de amonio o hidróxido de sodio en reflujos de etanol como disolvente.

### Resultados

La hidrólisis de los benzotiazol-Smetilisotiourea carboxilatos de sodio **3** ópticamente activos derivados del benzotiazol **1** en presencia de agua, los productos que se detectaron en mezcla de reacción correspondieron a los correspondientes carboxilatos de de las benzotiazolureas **4** como productos de la hidrólisis y materia prima. En el caso de la misma reacción con soluciones de hidróxido de amonio, la reacción conduce a una mezcla de dos productos, los correspondientes carboxilatos de las benzotiazolilureas **4** y los correspondientes carboxilatos de las benzotiazolilguanidinas **5** guanidinas. En el caso de las mismas reacciones con hidróxido de sodio, estas conducen a los carboxilatos de las benzotiazolilureas como únicos productos. Todos los compuestos sintetizados se purificaron y sus estructuras se analizaron por Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de <sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C y algunas por difracción de rayos X de monocristal.

### Conclusiones

La hidrólisis de los benzotiazol-SMeisotioureas en presencia de agua, requieren tiempos muy elevados de reflujos de etanol (3 días), La reacción en soluciones de Hidróxido de amonio conduce a una mezcla de productos, sin embargo, la reacción de hidrólisis con hidróxido de sodio, conduce a las correspondientes ureas como productos únicos en reflujos mas cortos (8horas).

### Bibliografía

1. Keri, S. R.; Patil, R. M.; Patil, A. S.; Budagumpi, S. A comprehensive review in current developments of benzotiazole based molecules in medicinal chemistry *Eur. J. Med. Chem.* **2015**, 89, 207-251.

Agradecimientos: proyecto SIP 20170706.