



Estudio de la energía del enlace de hidrógeno intramolecular en lactamas derivadas del auxiliar quiral α -metilbencilamina

Sandra Mejía Cabildo¹, Julio M. Hernández Pérez², Fernando Sartillo Piscil³

¹ Posgrado Ciencias Químicas BUAP, México ² Facultad de Ciencias Químicas BUAP, México

³ Facultad de Ciencias Químicas BUAP, México

e-mail: mejia.cabildo@gmail.com

Recientemente nuestro grupo de investigación ha mostrado la presencia de una interacción del tipo $C-H \cdots O$ en lactamas que contienen el auxiliar quiral α -metilbencilamina [1]. Esta interacción favorece la conformación de estructuras semejantes a la de anillos fusionados, observándose que se debilita conforme el tamaño de la lactama disminuye. En el presente trabajo se busca determinar los factores que contribuyen a la formación de esta interacción. Normalmente la identificación de un enlace de hidrógeno se apoya en su carácter estabilizador y por tanto en una contribución negativa a la energía molecular. Sin embargo, en el caso de un puente de hidrógeno intramolecular no existe un sistema de referencia único para determinar su energía. Por tal razón, en este estudio usamos dos métodos para estimar la energía de esta interacción. Un método conformacional [2,3], que usa como referencia a los respectivos conformeros *Z*. Además, se estima la energía de interacción usando el método de Espinosa [4], en el cual la energía está relacionada con la densidad de energía cinética en el punto crítico de enlace. Por lo que también se caracteriza el enlace de hidrógeno usando la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas [5].

El conjunto de moléculas a estudiar abarca desde la α -lactama, que genera un biciclo [1.3.0], hasta la ζ -lactama, biciclo [6.3.0]. Se analiza también el efecto de sustituyentes electroattractores y electrodonadores. Todos los cálculos se realizan a nivel MP2/aug-cc-pVDZ, ω B97XD/ aug-cc-pVDZ y M06/ aug-cc-pVDZ.

[1] Sandoval-Lira, J.; Fuentes, L.; Quintero, L.; Höpfl, H., Hernández-Pérez, J. M.; Terán, L. T.; Sartillo-Piscil, F. *J. Org. Chem.* **2015**, 80, 4481-4490.

[2] Schuster, P. *Mh. Chem.* **1969**, 100, 2084-2095.

[3] Schuster, P.; Schuster, P.; Zundel, G.; Sandorfy, C. *The Hydrogen Bond. Vol. I*; Ed North Holland. Amsterdam, **1976**, p. 567.

[4] Espinosa, E.; Molins, E.; Lecomte, C. *Chem. Phys. Lett.* **1998**, 285, 170-173

[5] Bader, R. F. W. *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*; Oxford University Press, **1990**, p. 75-240