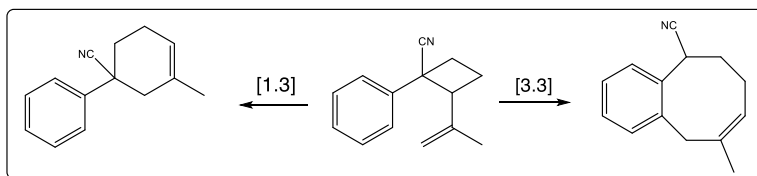


Estudio de los mecanismos de reacción presentes en las transposiciones sigmatrópicas de sistemas arilvinilciclobutánicos

Adrián Vázquez Sánchez¹, José Gustavo Ávila Zárraga¹

¹Departamento de química orgánica, Facultad de Química, UNAM; Ciudad de México, México.
e-mail: gavila@unam.mx

En el presente trabajo se muestran los resultados obtenidos al realizar un estudio sobre de los posibles mecanismos de reacción que presentan las transposiciones sigmatrópicas en los sistemas arilvinilciclobutánicos.



En sistemas divinilciclobutánicos han sido estudiados este tipo de reordenamientos¹, pero desafortunadamente no existe información al respecto cuando uno de los residuos vinílicos pertenece a un fragmento bencénico; no obstante este tipo de reacciones han demostrado ser de utilidad en la síntesis de algunos productos naturales². Sin embargo es fundamental conocer cuales son los mecanismo de reacción involucrados para entender las características geométricas y electrónicas que operan en la reacción y que son responsables de la divergencia regioisomérica observada. Esto nos permitirá tener un mejor entendimiento sobre el proceso, lo cual se traducirá en un mayor control experimental al momento de realizar este tipo de reordenamientos.

Para realizar dicho estudio se utilizaron metodologías basadas en teoría de funcionales de la densidad (DFT) mediante el análisis de las superficies de energía potencial (PES), de esta manera fue posible determinar los perfiles energéticos que siguen este tipo de reacciones así como las estructuras de los intermediarios participantes, se determinaron así los estados de transición (TS) y se determinaron las coordenadas intrínsecas de reacción (IRC).

- 1) a) Zora, M.; Özkan, I.; *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **2003**, 625, 251. b) Houk, K.N.; Li, Y.; Evanseck, J.D.; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **1992**, 31, 682.
- 2) Vázquez-Sánchez, A; Ávila-Zárraga, J., G.; *Tetrahedron Letters* **2015**, 39, 5321.