



ESTUDIO TEORICO DE LA CONVERSION DE OXAZOLIDINONAS (E)- α,β -INSATURADAS

Carmen Guadalupe Márquez¹, Vladimir Carranza Téllez², Blanca Marta Cabrera¹, Carla Aguirre¹,
Juan Carlos Ramírez¹

¹ Facultad de Ciencias Químicas, BUAP, México. ² Centro de Química, Instituto de Ciencias, BUAP, México.

carminlu.sp@gmail.com, *juan.ramirez@correo.buap.mx

La isomerización de compuestos carbonílicos α,β -insaturados que se convierten en los β,γ -insaturados, ha sido una reacción ampliamente estudiada. Una característica importante de ésta reacción es que produce el alqueno Z que es el producto menos favorecido termodinámicamente y el que tiene inesperada alta estereoselectividad. La causa se ha explicado por una *acidez conformacional*, que esencialmente implica el *syn-effect*. En el estado de transición sucede una desprotonación del γ -H por una base fuerte, que se supone como una hiperconjugación de un anión en formación que se alinea con el orbital $\pi^*C=C$. Además el estado de transición *syn* es favorecido, porque es estabilizado por la homoaromaticidad 6π -electrónica. La estereoquímica de la conversión de la oxazolidinonas (E)- α,β -insaturado al correspondiente β,γ -insaturado se supone se efectúa por el *syn-effect* y en proporción relativa por los γ -sustituyentes.

La reacción de isomerización fue estudiada usando métodos computacionales. Se calcularon la energía total de diferentes N-enoyloxazolidinonas en las conformaciones Z y E. Se determinó el estado de transición para determinar si el protón γ -H está alineado con el orbital $\pi^*C=C$. Se realizó un cálculo *ab initio* con el método HF/6-31G* utilizando IRC para obtener el estado de transición, y los orbitales para el γ -H y el orbital $\pi^*C=C$.

La (E)N-enoyloxazolidinone tiene una energía total -1581.3936013 hartrees, la energía de HOMO es -20.62042 hartrees. Para el isómero (Z) N-enoyloxazolidinone la energía total es -1581.3847626 hartrees. La energía HOMO es -20.62064 hartrees.

Nakano, Soeta, Endo, Inomata, Ukaji. *J. Org. Chem.* **2013**, *78*, 12654.

Tayama, E.; Toma Y. *Tetrahedron* **2015**, *71*, 554.

Jiménez, J.; Ramírez, J.C.; Huelgas G.; Meléndrez R.; Cabrera-Vivas, B.M.; Sansinenea, E.; Ortiz, J.A. *Tetrahedron* **2015**, *71*, 4590