



ANÁLISIS TEÓRICO DE LA INTERACCIÓN MOLECULAR DE OXAZOLIDINAS FRENTE A REACTIVOS TIPO DITIADIFOSFETANOS

Avelino Cortés Santiago¹, Rubicelia Vargas², Jorge Garza²

¹Facultad de Ciencias Químicas. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. Av. San Claudio y 18 sur. C.P. 72530. Puebla, México.

²Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina Iztapalapa. C. P. 09340. México D.F. México.

e-mail: avlcorso@gmail.com

En este trabajo se analiza teóricamente el intercambio O/S del grupo oxo en la reacción de tiónación de una familia de oxazolidinas del tipo oxazol-[3, 2-a]piperidin-5-onas¹ utilizando como agentes tionantes una serie de reactivos que pertenecen a la familia de los ditiadifosfetanos de los cuales el reactivo de Lawesson² es el más representativo. Los descriptores de reactividad química utilizados se encuentran definidos dentro de la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT). El análisis energético y geométrico se complementó con el mapeo del potencial electrostático molecular lo que permitió visualizar las diferentes contribuciones electrostáticas. Para obtener estas cantidades, se calculó la estructura electrónica de estos compuestos con la metodología, basada en la DFT dentro del modelo de Kohn-Sham, PBE0-1/5 acoplado con el conjunto de funciones de base 6-311++G(d,p), la cual se demostró que es la adecuada y asequible para este tipo de sistemas³. Encontramos que los efectos estructurales juegan un papel muy importante en la tiónación de estos sistemas. Los resultados obtenidos concuerdan bien con las observaciones experimentales y, además, muestran nuevas evidencias para explicar la reactividad química de estos sistemas.

Referencias:

1. Lumbreras, A.; Gnecco, D.; Terán, J.; Juárez, J.; Orea, L.; Hernández, S.; Enríquez, R. J. Mex. Chem. Soc. 2007, 51(2), 103.
2. Cava, M.P.; Levinson, M.I. Tetrahedron 1985, 41, 5061–5087.
3. Cortés-Santiago, A.; Vázquez-Mayagoitia, A.; Martín del Campo, J.; Soriano Agueda, L. A.; Vargas, R.; Garza, J. Comp. Theo. Chem. 2015, 1062, 36-43.