

EFFECTO DE LAS INTERACCIONES C-H...X (X = O, N) EN LA ESTABILIDAD DE CONFÓRMEROS ECLIPSADOS

Eduardo Hernández-Huerta¹, Gabriel Cuevas²

^{1,2} Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

e-mail: eduardohrhzh@gmail.com

La preferencia por conformeros alternados sobre los eclipsados es una propiedad intrínseca en sistemas orgánicos, tal como se observa en el grupo metilo de la orto-amina tricíclica anhidra (**1**). Sin embargo, la presencia de moléculas de agua en (**1**) favorece un ligero eclipsamiento del grupo metilo (**1**•3H₂O), donde el ángulo de torsión N-C-C-H es de 8.0(9)°, ver Figura.^{1, 2} Entender el mecanismo a través del cual las interacciones C-H...O inducen dicho eclipsamiento, tiene una fuerte implicación en el control conformacional que es posible conseguir dada la presencia de un campo externo, representado por interacciones inter-moleculares. Bajo este contexto se abordó el estudio conformacional de los sistemas (**1**) y (**1**•3H₂O), en estado sólido empleando el nivel M06-2X/POB-pVTZ en CRYSTAL 14 y en el vacío al nivel M06-2X/6-311++G(2d,2p) en Gaussian 09. El análisis de la densidad electrónica bajo el esquema de la Teoría Cuántica de Átomo en Moléculas, permitió identificar las interacciones inter-moleculares y el impacto que éstas tienen sobre la contribución atómica a las propiedades moleculares de los sistemas de interés, para ello, se utilizó el módulo TOPOND y AIMALL.15.09.27.

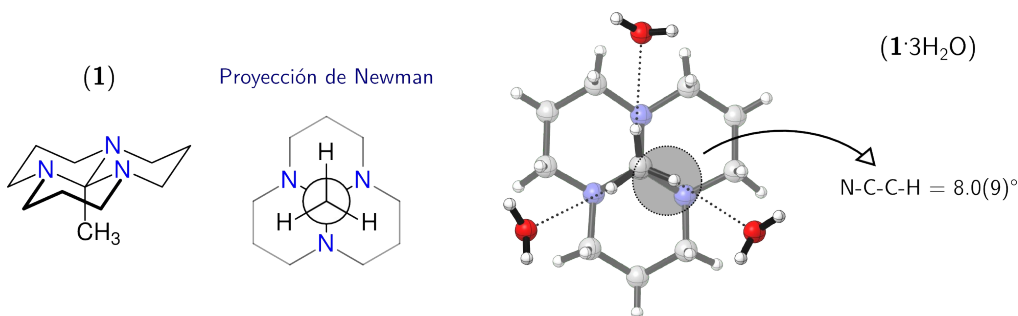


Figura. Esquema de la orto-amina tricíclica (**1**) anhidra e (**1**•3H₂O) hidratada.

La relevancia del presente trabajo radica en comprender como es posible modificar el grado de eclipsamiento, vía diversos arreglos de moléculas de agua o bien modificando la naturaleza de las interacciones inter-moleculares.

[1] Paul S.; Gary R. W.; Eric D. G.; Frank W.; Van B. J.; Jack D. D. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1987**, 26(11), 1175-1177.

[2] Paul S.; Jack D. D. *Helvetica Chimica Acta.* 1989, 72, 1125-1135.