

ESTUDIO TEÓRICO-EXPERIMENTAL DE LAS INTERACCIONES PRESENTES EN DÍMEROS DE AMIDAS E IMIDAS

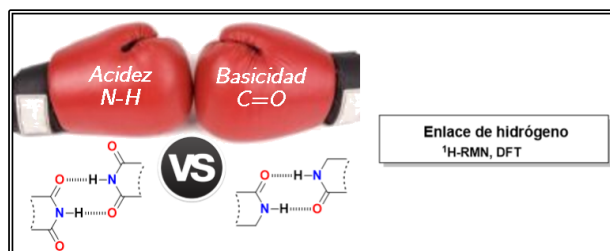
Wilmer Vallejo¹, Tomás Rocha¹ y Marcos Hernández²

¹Departamento de Físicoquímica, Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México;
México

²Departamento de Química Orgánica, Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de
México; México

e-mail: wilmervall@gmail.com

Estudios experimentales revelan que la auto-asociación de imidas y amidas disminuye al aumentar la acidez de los hidrógenos, lo cual es un resultado inesperado, puesto que las interacciones que unen a estos grupos son enlaces de hidrógeno.¹ Teniendo en cuenta lo anterior, este proyecto pretende estudiar de forma experimental y teórica las interacciones de los sistemas mencionados. Para ello, se determinaron constantes de dimerización mediante ¹H-RMN para distintos grupos de amidas e imidas, y también se tuvieron en cuenta datos reportados en la literatura.^{2,3} Con la metodología SMD-M06-2x/6-311++G(2d,2p) se obtuvieron las energías de formación de los dímeros, así como las energías de protonación del grupo carbonilo y la disociación del enlace N-H. Los resultados revelan que las energías de formación son directamente proporcionales a las constantes de dimerización experimentales, y además, se encontró un modelo lineal que relaciona la energía de formación con los parámetros energéticos de acidez y basicidad. De esta manera, se pretende aumentar el entendimiento de estas interacciones, con el fin de establecer un modelo que explique los datos experimentales relacionados con la dimerización de este tipo de compuestos, y por ende, dar propuestas a modificaciones estructurales que permitan modular el reconocimiento molecular de estos sistemas.



Referencias:

¹Jeong, K. S.; Tjivikua, T.; Rebek, J. Jr. *J. Am. Chem. Soc.*, **1990**, *112*, 3215-3217.

²Jorgensen, W.; Severance, D. L. *J. Am. Chem. Soc.*, **1991**, *113*, 209-216.

³Hine, J.; Hahn, S.; Hwang, J. *J. Org. Chem.*, **1988**, *53*, 884-887.