

ANÁLISIS CONFORMACIONAL Y ESPECTROSCÓPICO DE HALOACETAMIDAS

Nadia Gruber,^a Liliana Orelli,^a Rubén Contreras.^b

^a Departamento de Química Orgánica, FFyB, UBA, CONICET, Junín 956, (1113) Buenos Aires, Argentina; ^b Departamento de Física, FCEyN, UBA e IFIBA, CONICET. E-mail: ngruber@ffyb.uba.ar.

Las haloacetamidas son compuestos versátiles en cuanto a su estructura por la posibilidad de presentar variadas sustituciones en el nitrógeno amídico. Esta diversidad estructural es también origen de la gran cantidad de aplicaciones que se atribuyen a estos compuestos, entre las que se destacan su actividad herbicida¹ y como antioxidante en elastómeros y polímeros plásticos.² En particular, nuestro grupo de trabajo sintetiza estas moléculas como precursoras de fosfonoacetamidas según la reacción de Michaelis-Arbuzov.³

La importancia del tema de trabajo, es decir el análisis conformacional y espectroscópico de haloacetamidas, radica en la posibilidad de hacer predicciones sobre el comportamiento y la reactividad de estas moléculas a través del conocimiento de su estructura espacial.

En este trabajo se desarrollan los siguientes tópicos:

- Determinación de la conformación más estable de la *N*-fenilcloroacetamida mediante métodos computacionales.
- Determinación de $^1J_{\text{C}\alpha\text{H}\alpha}$ y análisis NBO de la *N*-fenilcloroacetamida.
- Comparación con los datos presentados por Pedersoli *et al.*⁴ para la cloroacetamida.
- Comparación de los resultados obtenidos con datos espectroscópicos experimentales.

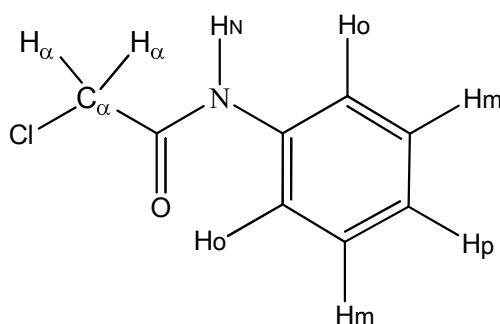


Figura 1: Estructura de la *N*-fenilcloroacetamida, conteniendo la nomenclatura utilizada a lo largo del trabajo para hacer referencia a los diferentes átomos.

Los métodos computacionales permitieron determinar la configuración *Z* de la amida con el cloro en posición *anti* con respecto al oxígeno como la estructura más estable para la *N*-fenilcloroacetamida. La predominancia de las estructuras *Z* para las amidas *N*-monosustituidas, frente a las *E*, condice con datos bibliográficos⁵, mientras que la

estabilidad de las distintas conformaciones posibles para la configuración *Z* es discutida en este trabajo.

La determinación de $^1J_{\text{CaHa}}$ para la *N*-fenilcloroacetamida mostró resultados análogos a los obtenidos por Pedersoli *et al.* para la cloroacetamida. Sin embargo, con respecto a otros acoplamientos, se presentan resultados novedosos dependientes de la existencia de un grupo fenilo vecino al oxígeno carbonílico.

Por último, es de importancia mencionar que los valores calculados muestran una adecuada correlación con los datos experimentales.

Referencias:

1. Entre otros: US Patent, 2973258, **1961**.
2. US Patent, 4098760, **1978**.
3. N. Gruber, M. C. Mollo, M. Zani, L. R. Orelli, *Synth. Commun.*, **2012**, *42*, 5, 738.
4. S. Pedersoli, C. F. Tormena, F. P. dos Santos, R. H. Contreras, R. Rittner, *J. Mol. Struct.*, **2008**, *891*, 508.
5. W. E. Stewart, T. H. Sidall, *Chem. Rev.*, **1970**, *70*, 5, 517.

Agradecimientos:

Este trabajo fue financiado por la Universidad de Buenos Aires y el CONICET.