

INFLUENCIA DE LA IRRADIACIÓN UV-VIS EN EL EQUILIBRIO CONFORMACIONAL DE LA 1,1,3-TRICLORO-3,3,1-TRIFLUOROACETONA EN MATRICES CRIOGÉNICAS DE Ar Y N₂

Agustín Spaltro, Diego F. Castillo Ortiz, Luciana M. Tamone, Rosana M. Romano

CEQUINOR (CONICET-UNLP-Asoc.CICPBA) Boulevard 120, e/ 60 y 64, N°1465, La Plata, Buenos Aires, Argentina

Correo electrónico de contacto: aspaltro@quimica.unlp.edu.ar

Las cetonas polihalogenadas son de gran interés dada su versatilidad en síntesis orgánica. La presencia de los halógenos condiciona sus propiedades electrónicas y conformacionales, afectando su reactividad [1].

En este trabajo se llevó a cabo el análisis del equilibrio conformacional de la 1,1,3-tricloro-3,3,1-trifluoroacetona (TCTFA) mediante una combinación de espectroscopias vibracionales (FTIR en fase gaseosa, Raman y FTIR de matriz de Ar y N₂). Los resultados fueron respaldados por cálculos computacionales utilizando métodos ab-initio y DFT. La superficie de energía potencial calculada permite determinar los mínimos de energía, prediciendo así un equilibrio entre tres formas a temperatura ambiente, siendo el conformero *gauche-anti* (con el doble enlace C=O en *gauche* con respecto al enlace C-Cl y *anti* respecto al C-F) la forma preferida, seguida por el rotámero *syn-gauche*. A través de la irradiación con luz UV-visible durante diferentes tiempos (15 y 30 s y 1, 2, 4, 8, 16, 32, 62 y 109 min), se pudo observar un proceso de interconversión conformacional (Figura 1), comprobado por el incremento de la intensidad de bandas correspondientes a los conformeros de menor energía

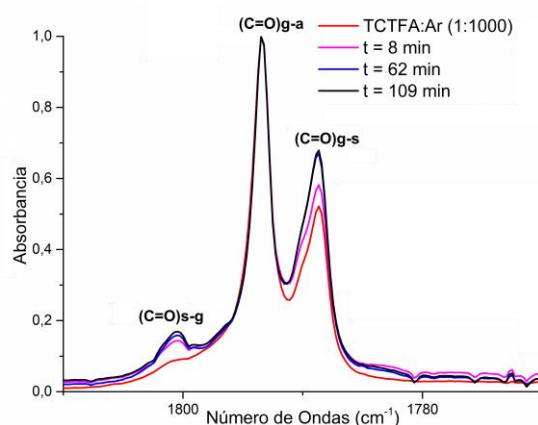


Figura 1. Espectro FTIR en la región carbonílica de una matriz de TCTFA:Ar 1:1000 luego del depósito (trazo rojo), y después de 8 (trazo rosa), 62 (trazo azul) y 109 minutos (trazo negro) de irradiación con luz UV-visible.

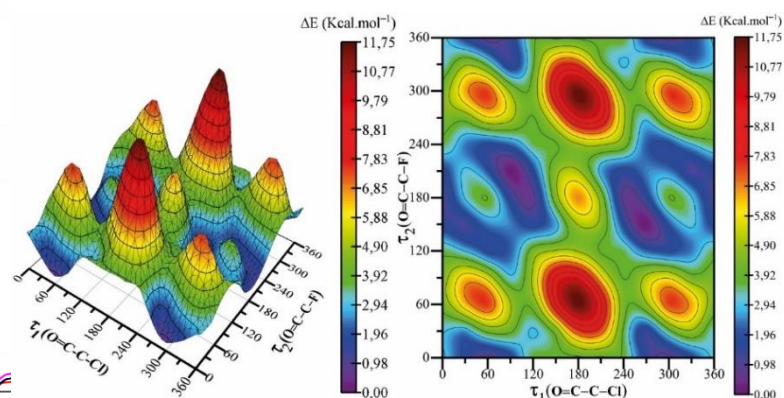


Figura 2. Superficie de energía potencial y mapa de contorno de la TCTFA calculada con la aproximación B3LYP/6-31+g(d)

Agradecimientos: Al CONICET (PUE-22920170100053CO), la UNLP (11/X971) y la ANPCyT (PICT 2020-3746) por el apoyo financiero.

Referencias [1] Pattison, G. *Beilstein J. Org. Chem.*, **2017**, 13, 2915–2921.