

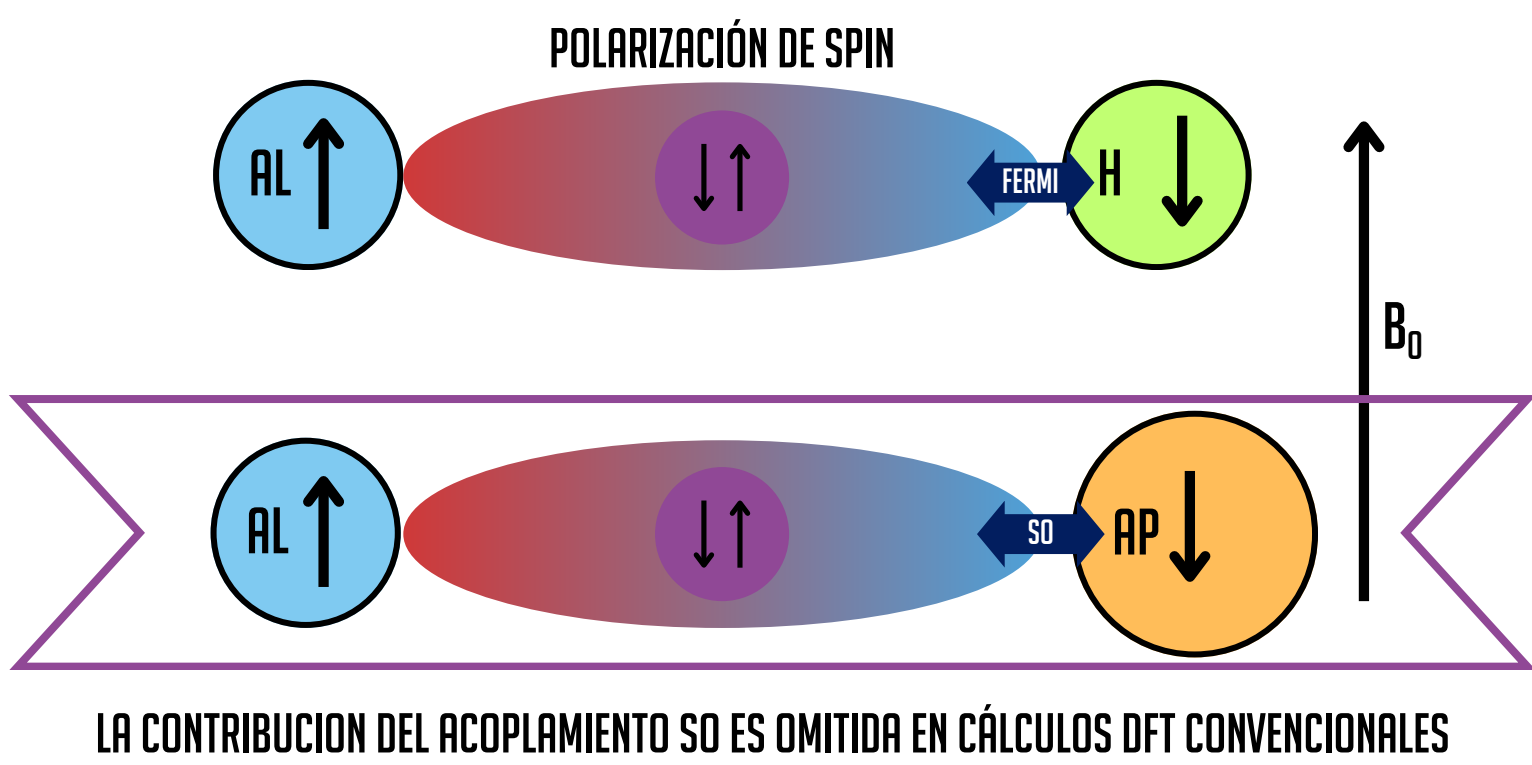
Lucas Passaglia,<sup>1,2</sup> Ignacio Maciá,<sup>2</sup> María M. Zanardi,<sup>2</sup> Ariel M. Sarotti<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Química Rosario (IQUIR, CONICET-UNR) and Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, Suipacha 531, Rosario, República Argentina.

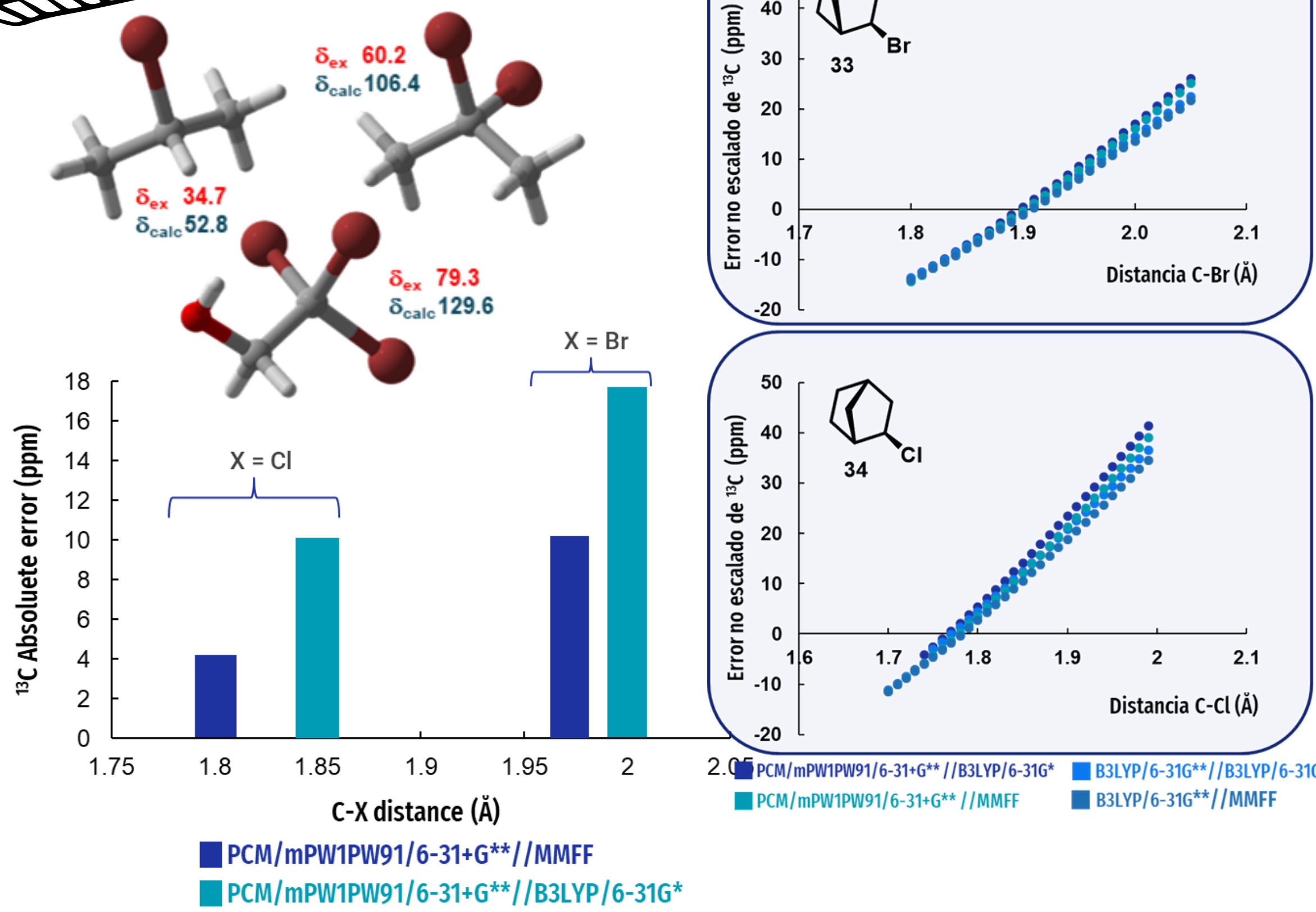
<sup>2</sup> Instituto de Investigaciones en Ingeniería Ambiental, Química y Biotecnología Aplicada (INGEBIO), Facultad de Química e Ingeniería del Rosario, Pontificia Universidad Católica Argentina, S2002QEO Rosario, Argentina.

### INTRODUCCIÓN

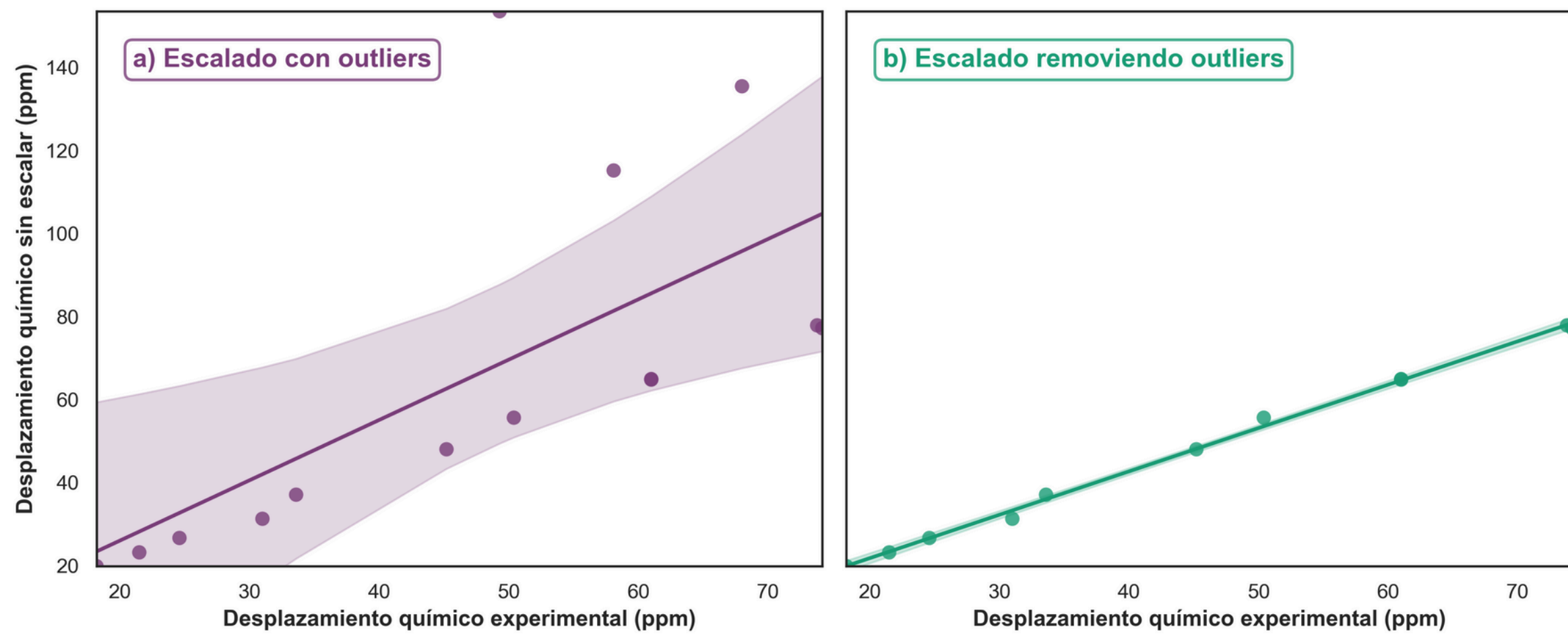
La elucidación estructural asistida por cálculos cuánticos de RMN, y en particular DP4+, se ha consolidado como una herramienta eficaz para la determinación estereoquímica<sup>1</sup>. Sin embargo, en moléculas que contienen átomos pesados como S, I, Cl o Br, el efecto HALA (*Heavy Atom on Light Atom*) puede modificar los desplazamientos químicos de los núcleos ligeros vecinos, afectando la confiabilidad de los cálculos y su interpretación<sup>2</sup>.



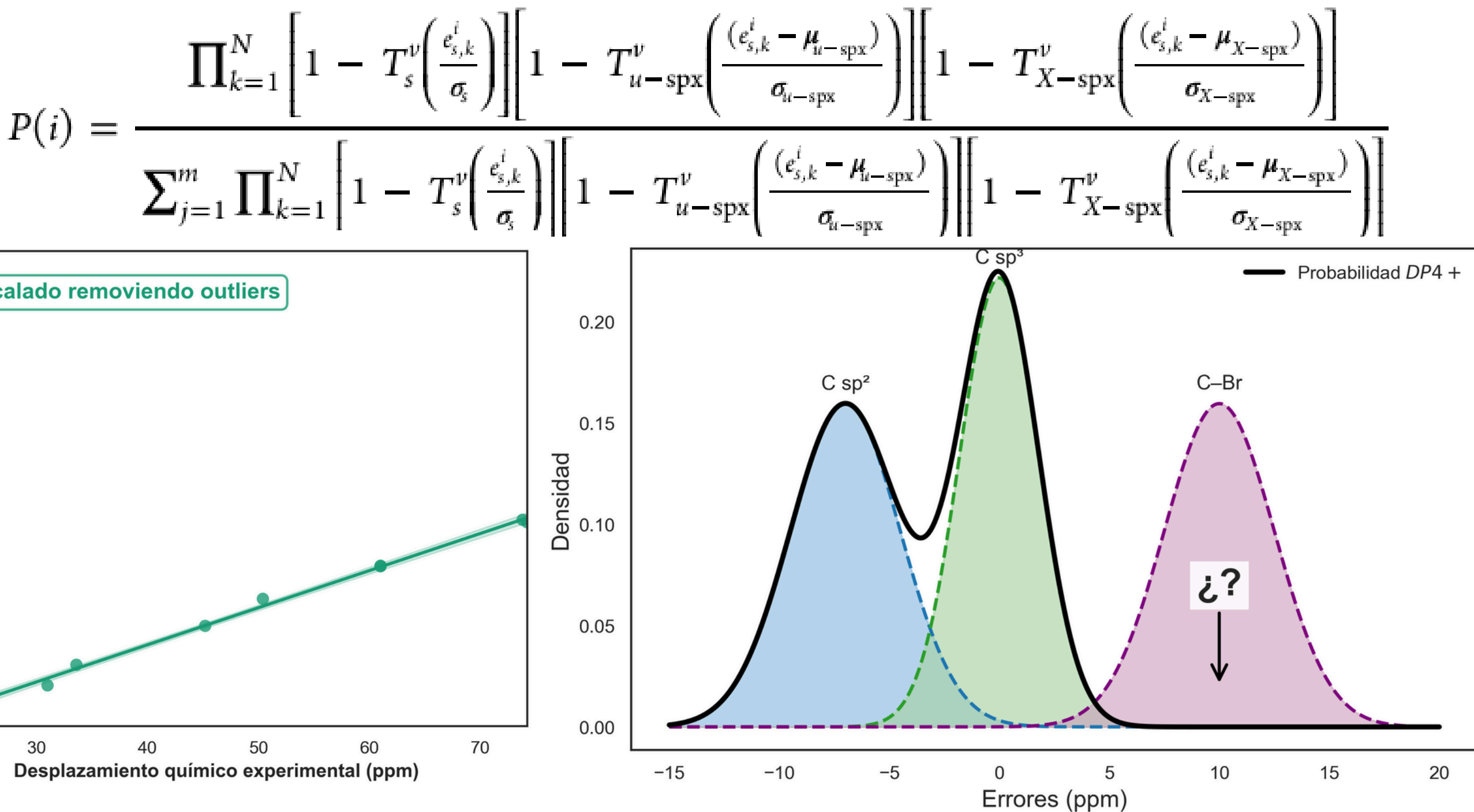
### IMPACTO DE HALA EN RMN



### EFECTO SOBRE DP4+

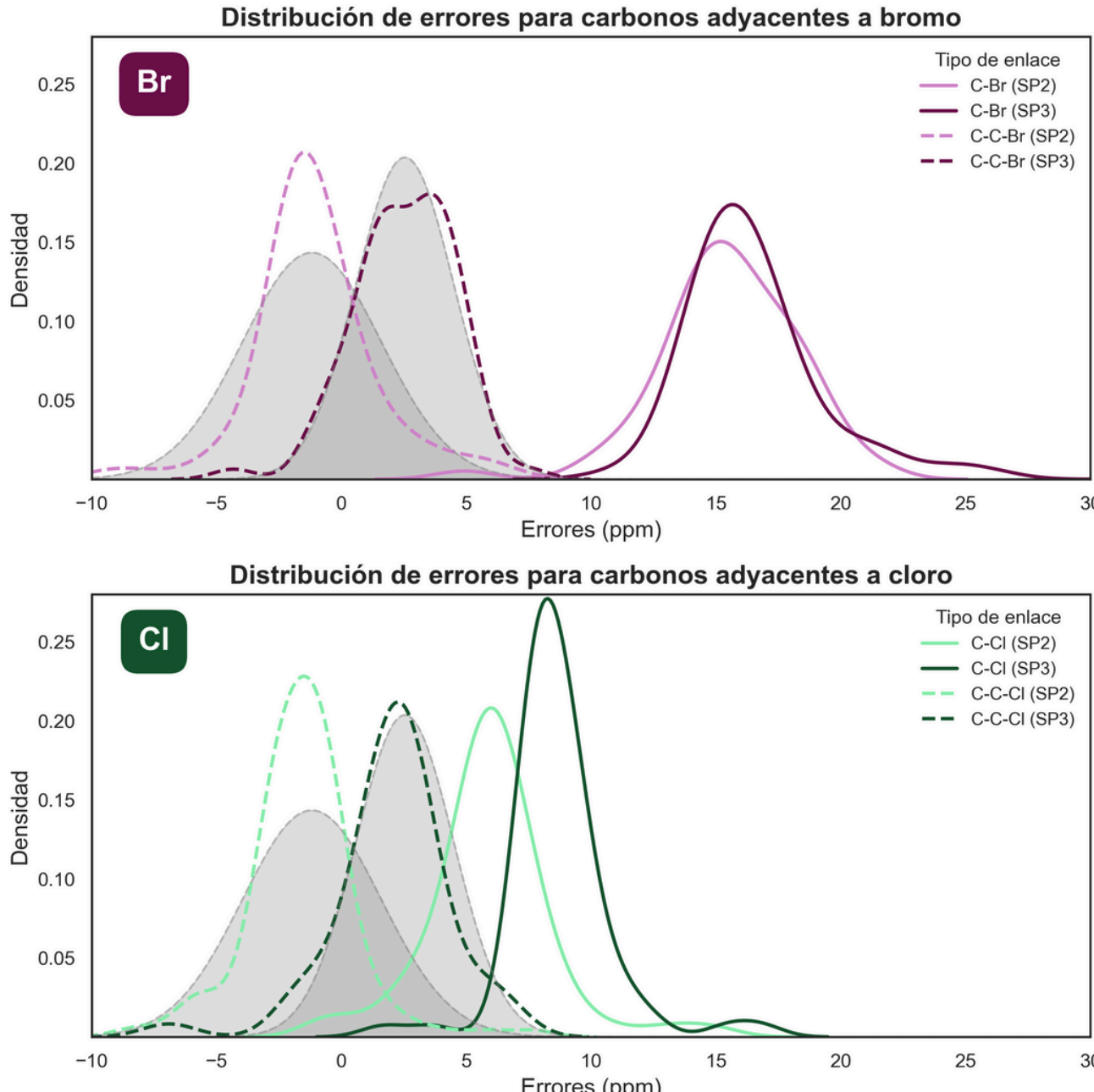


### IMPACTO DE ERRORES GRANDES SOBRE PROBABILIDAD ESCALADA Y NO ESCALADA

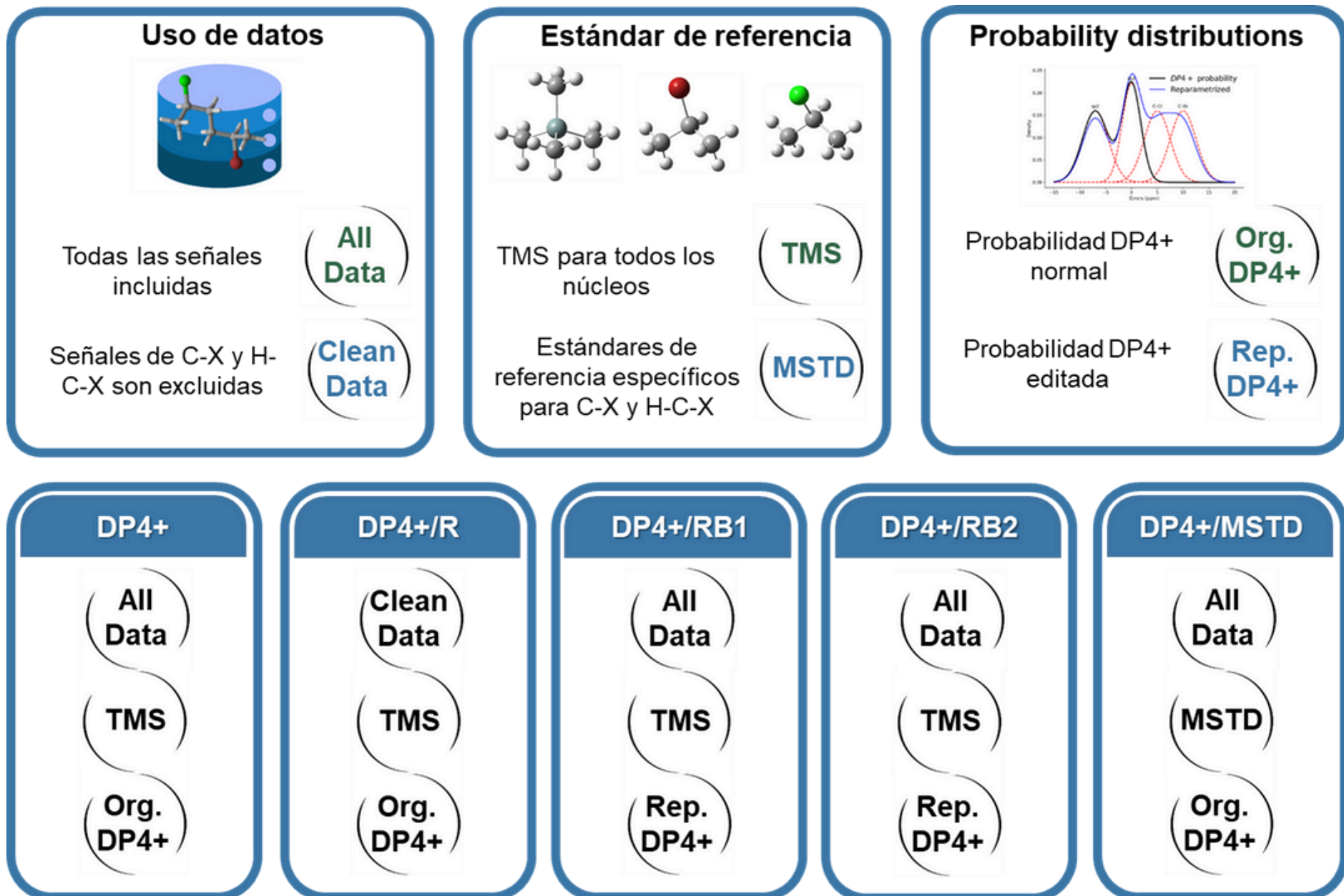


### BROMO Y CLORO

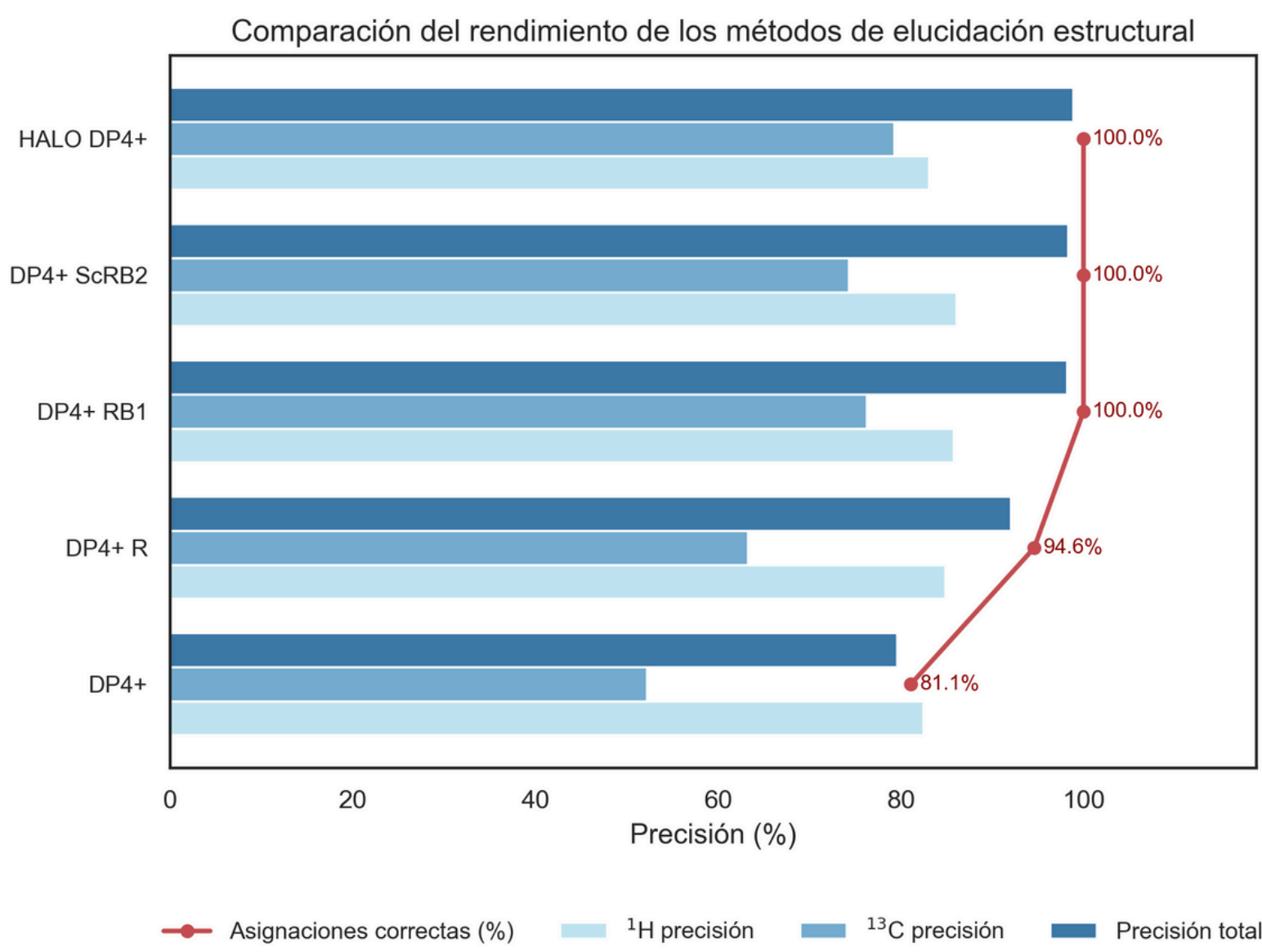
### DISTRIBUCIÓN DE ERRORES NO ESCALADOS



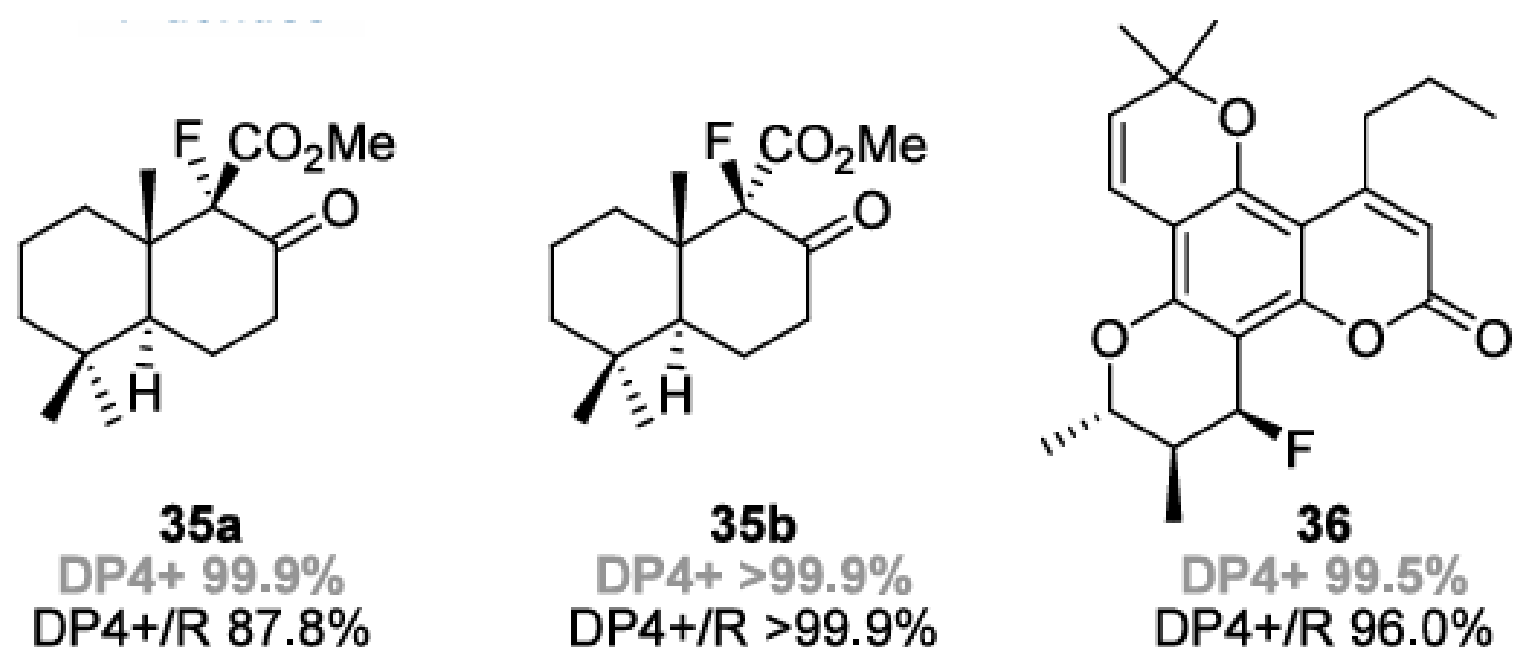
### MÉTODOS DE CORRECCIÓN EVALUADOS



### RESULTADOS

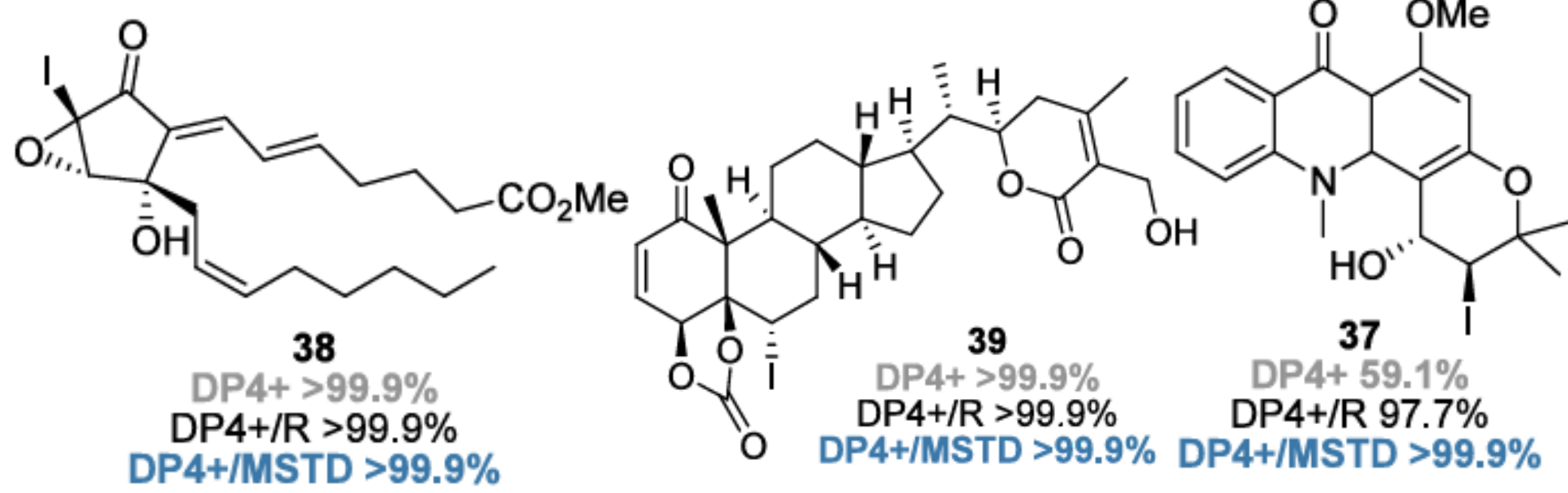


MAE Error no escalado C-F: 1.5 ppm

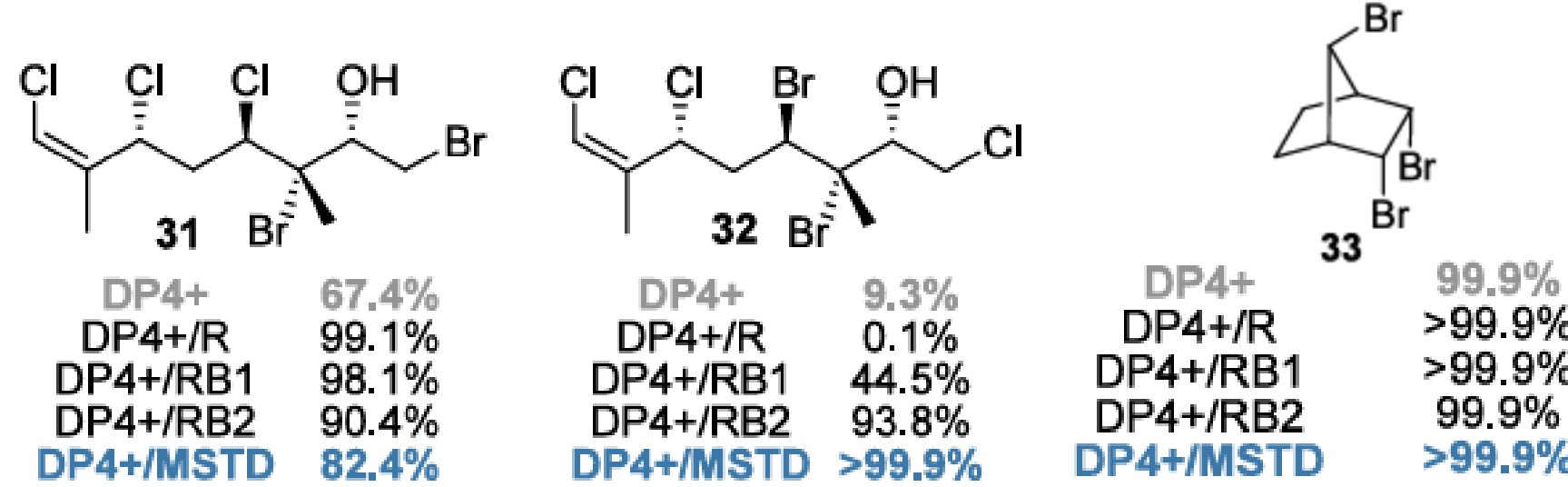


### YODO

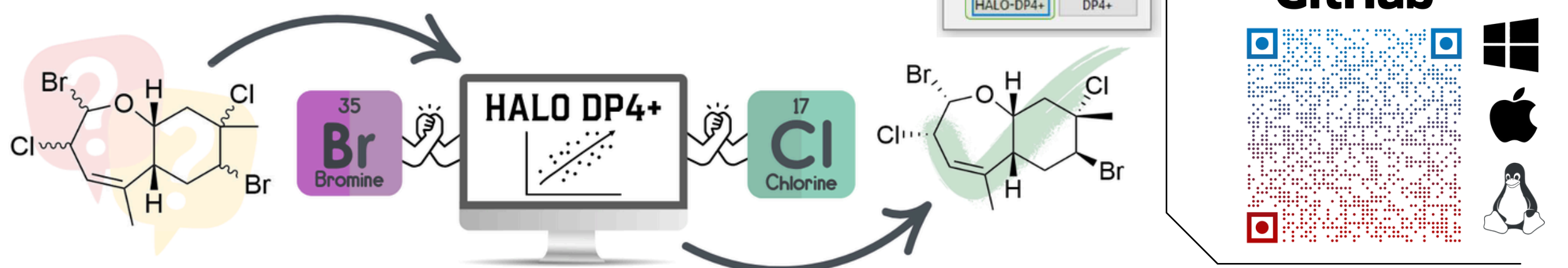
MAE Error no escalado C-I: 35 ppm



### EVALUACIÓN DE LOS MÉTODOS SOBRE SISTEMAS DESAFIANTES

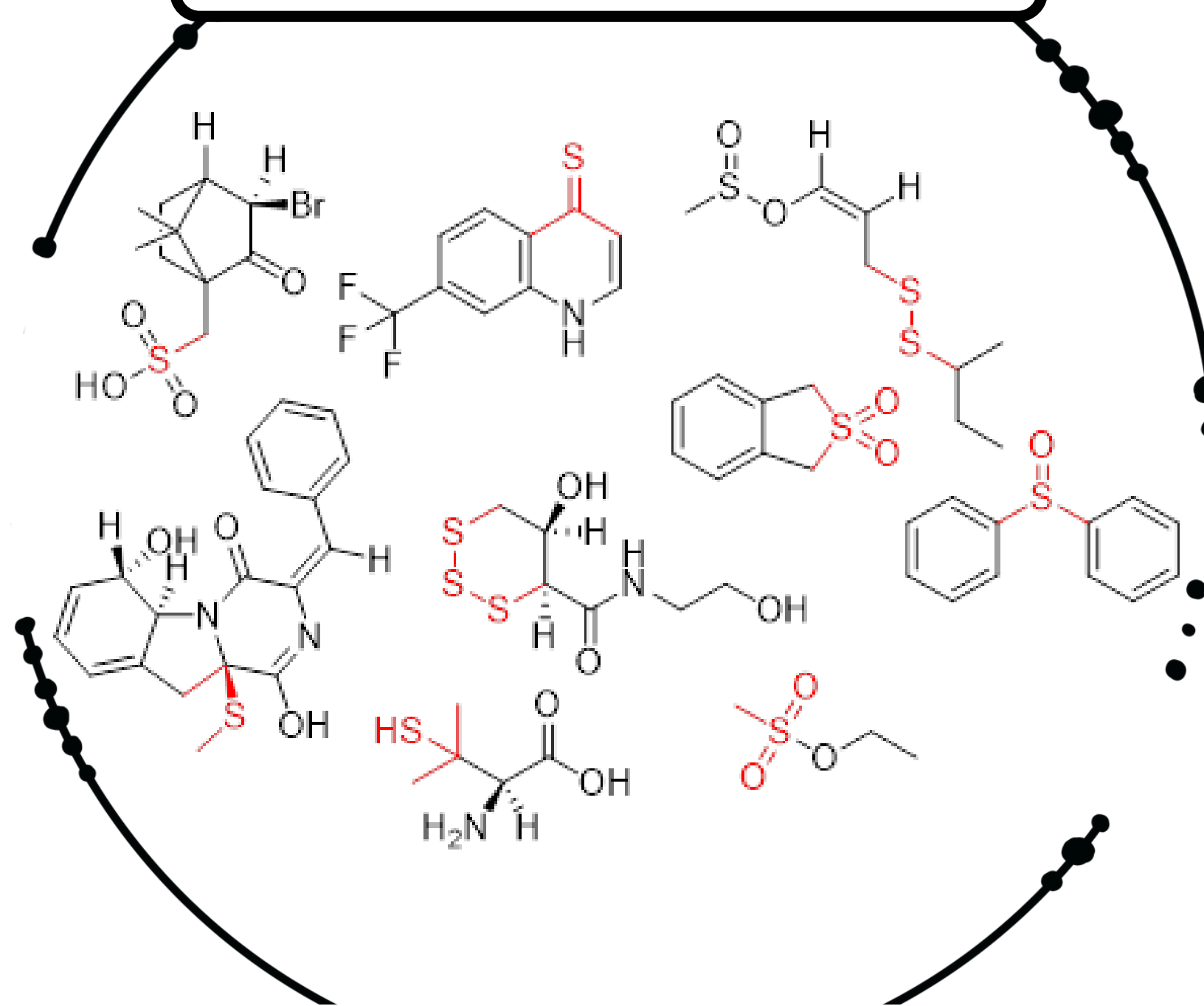


### AUTOMATIZACIÓN DE HALO-DP4+ COMO DESKTOP APP<sup>3</sup>

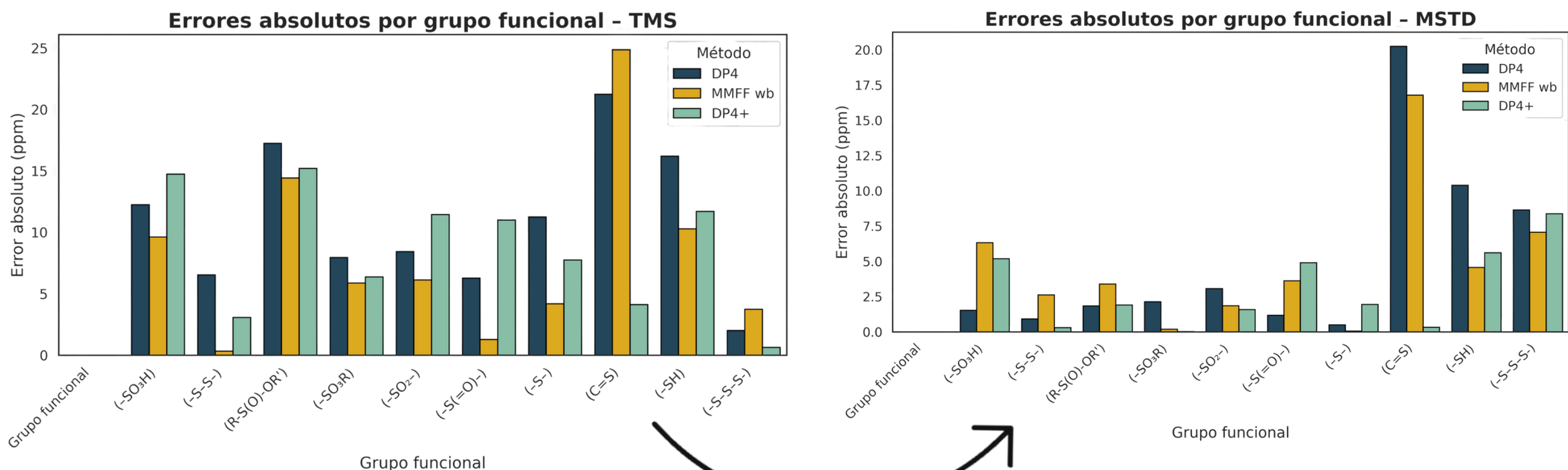


### AZUFRE

No hay un unico tipo de unión C-S



### Evaluación de errores por grupo funcional



Correccion con MSTD (S-sp<sup>3</sup> + S-sp<sup>2</sup>)

### REFERENCIAS

- Grimblat, N.; Zanardi, M. M.; Sarotti, A. M. *J. Org. Chem.* **2015**, 80, 12526–12534.
- Passaglia, L.; Zanardi, M. M.; Sarotti, A. M. *Org. Biomol. Chem.*, **2024**, 22, 2435–2442
- Passaglia, L.; Franco, B. A.; Zanardi, M. M.; Sarotti, A. M. *J. Org. Chem.* 2025, en prensa

### CONCLUSIONES

- Se estudió el efecto HALA y su impacto en DP4+
- Se desarrolló una metodología automática de corrección para moléculas con Br y Cl
- Se avanzó en el estudio de compuestos con I y S para el desarrollo de HA-DP4+

COMING SOON

ACCESO AL POSTER

