



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE TUCUMÁN

naifq

ASOCIACIÓN ARGENTINA DE
INVESTIGADORES EN FÍSICOQUÍMICA
PERSONERÍA JURÍDICA 2058

XXI CONGRESO ARGENTINO DE FÍSICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA

LIBRO DE RESÚMENES



TUCUMÁN
ARGENTINA



XXI CONGRESO ARGENTINO DE FISIQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA
TUCUMÁN- ABRIL 2019

B4 - COMPARACIÓN DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y VIBRACIONALES DE TRIFLUOROMETANSULFONATO DE 1-FENIL VINILO Y DE TRIFLUOROMETANSULFONATO DE BENZOILO

Galván Jorge E.¹, Ulic Sonia E.^{2,3}Tuttolomondo Ma. Eugenia¹ y Ben Altabef Aida¹.

¹INQUINOA-CONICET, Fac. de Bioqca., Qca. y Farmacia, UNT, R. Argentina. ²CEQUINOR, Dpto. de Química, Fac. de Cs. Exactas, UNLP, C. C. 962, 1900, La Plata, R. Argentina.

³Dpto. Cs. Básicas, UNLu, Rutas 5 y 7 (6700) Luján; Argentina. jorgegalvanqca@gmail.com

Introducción

Los sulfonatos^[1]son buenos agentes alquilantes y actúan entrecruzando las cadenas de ADN. Los derivados presentados en este trabajo están sustituidos por grupos interesantes desde el punto de vista de su potencial aplicación. El grupo benzoilo es conocido por su propiedad antiviral, la que puede ser modulada por la introducción de grupos órgano sulfurados en sus estructuras. El grupo vinil-fenilo pertenece a la familia de los estírenos, en los cuales pequeños cambios en la estructura del monómero afectan las propiedades del polímero correspondiente. Por otro lado, ambos sulfonatos estudiados poseen en su estructura el grupo trifluorometilo que es el grupo que contiene flúor más utilizado, dado a que es un grupo fuertemente atractor de electrones^[2] y a su alta lipofilidad.

Resultados

Los sulfonatos fueron sintetizados según la literatura, ambos compuestos se obtuvieron en estado líquido. Al no tener parámetros geométricos experimentales, se realizó una búsqueda conformacional utilizando el concepto de transferibilidad conformacional para encontrar las estructuras más estables. Se midieron los espectros de infrarrojo y Raman en estado líquido. Para la asignación de los modos fundamentales, se tuvo en cuenta la asignación correspondiente de moléculas relacionadas y las frecuencias calculadas al nivel B3LYP /6-311G(3df). También se analizaron las contribuciones de las energías de interacción donante → aceptor mediante la aproximación de los Orbitales Naturales de Enlace (NBO).

Conclusiones

En los ésteres $\text{CF}_3\text{SO}_2\text{OC}(\text{O})\text{C}_6\text{H}_5$ y $\text{CF}_3\text{SO}_2\text{OC}(\text{CH}_2)\text{C}_6\text{H}_5$ el ángulo diedro CSOC toma los valores de $109,1^\circ$ y $-73,9^\circ$ respectivamente, que corresponden a la forma *gauche*. Estos valores del ángulo diedro se encuentran afectados por un efecto de hiperconjugación (efecto anomérico) por el cual el par libre centrado formalmente en el átomo de C(X=O, C), se encuentra deslocalizado dentro del orbital molecular σ antienlazante del enlace C-S vecino, donde la presencia de un átomo electronegativo, como el flúor, favorece la interacción.

Además, el valor del ángulo diedro R-CCC(R=C, O) es de 169° y -180° , respectivamente y el mismo está afectado por la alta densidad electrónica que hay entre los grupos carbonilo/vinilo y fenilo, estabilizando la forma *cuasi-anti*, donde el grupo carbonilo/vinilo se encuentra ligeramente fuera del plano del fenilo.

Referencias

[1] M. E. Tuttolomondo, A. Navarro, T. Peña, M. P. Fernández-Lienres, J. M. Granadino-Roldán, M. Fernández Gómez, Chem. Phys., 2009, 361, 94.

[2] Purser S.; Moore P. R.; Swallow S.; Gouverneur, V., Chem. Soc.Rev. 2008, 37, 320.