



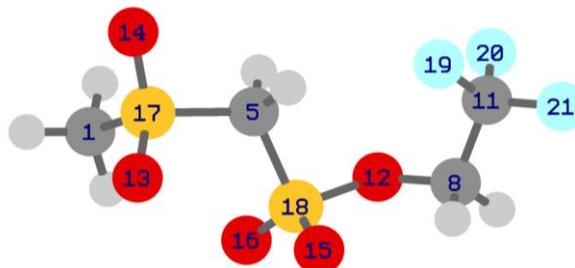
## XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

### ESTUDIO ESTRUCTURAL Y VIBRACIONAL DE METANSULFONATO DE TRIFLUOROETIL (METILSULFONILO), TFMSMS: $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{CH}_2\text{SO}_2\text{-O-CH}_2\text{CF}_3$

Galván J.E.<sup>1</sup>, Contreras Aguilar E.<sup>2</sup>, Ulic S.E.<sup>2,3</sup>, Ben Altabef A.<sup>1</sup> y Tuttolomondo M.E.<sup>1</sup>.

1 INQUINOA-CONICET, Fac. de Bioqca., Qca. y Farmacia, UNT, R. Argentina.  
2 CEQUINOR, Dpto. de Química, Fac. de Cs. Exactas, UNLP, a Plata, R. Argentina.  
3 Dpto. Cs. Básicas, UNLu, Rutas 5 y 7 (6700) Luján; R. Argentina  
jorgegalvanqca@gmail.com

**Introducción:** Se sintetizó el metansulfonato de trifluoroetil (metilsulfonilo) **TFMSMS (Figura 1)**, que es un derivado del Clomesone<sup>1</sup>. Estos compuestos son importantes desde el punto de vista biológico debido a que son buenos agentes alquilantes. Estos pueden reaccionar con los centros nucleofílicos de macromoléculas, específicamente interactúan con las moléculas de ADN.



**Figura 1:** Numeración de los átomos en el **TFMSMS**.

**Resultados:** El **TFMSMS** fue preparado según la literatura<sup>1</sup>, el cual se obtuvo en estado sólido. Con la exploración conformacional se encontró una sola conformación estable a temperatura ambiente. Se midieron los espectros de infrarrojo, Raman y RMN en estado sólido. 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) y sus propiedades topológicas (AIM).

**Conclusiones:** Las deslocalizaciones más importantes en un sulfonato es la del par de electrones libre del átomo de O12 (esterificado) hacia los orbitales  $\sigma^*$  S(17)-C(1),  $\sigma^*$ S(17)-C(5) y  $\sigma^*$  S(18)-C(5). Adicionalmente, la donación de electrones  $\sigma$  que afecta los ángulos diedros C(1)-S(17)-C(5)-S(18) y S(17)-C(5)-S(18)-O(12) de la molécula (en los que se encuentran involucrados dichos átomos) genera una mayor población en estos orbitales antienlazantes. En consecuencia, la mayor distancia de enlace C-S (enlace vecino al grupo sulfonato) predicha se comprueba experimentalmente porque su frecuencia de estiramiento aparece a menores números de onda que el resto de los enlaces C-S de la molécula.

#### Referencias

1) Galván, J. E., Defonsi Lestard, M. E., Piro, O. E., Echeverría, G., Molina, R.D.I., Arena, M. E., Ulic, S. E., Tuttolomondo, M. E., Ben Altabef A., New J. Chem., **2018**, 42, 11073-11084..