

ISBN: 978-987-754-185-4



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE TUCUMÁN

naifq

ASOCIACIÓN ARGENTINA DE
INVESTIGACIÓN EN FÍSICOQUÍMICA
Pensocoria Jurídica 2048

XXI CONGRESO ARGENTINO
DE FÍSICOQUÍMICA Y
QUÍMICA INORGÁNICA

LIBRO DE RESÚMENES



TUCUMÁN
ARGENTINA

XXI Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica / Carlos Della Védova ... [et al.] ;

compilado por Aída Ben Altabef ; Mónica Mercedes Vergara ; Sonia B. Díaz ; editado

por Aída Ben Altabef ; Mónica Mercedes Vergara ; Sonia B. Díaz. - 1a ed . - San Miguel

de Tucumán : Universidad Nacional de Tucumán. Facultad de Bioquímica Química y

Farmacia, 2019.

Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-987-754-185-4

1. Química Inorgánica. 2. Nanotecnología. 3. Fotoquímica. I. Della Védova, Carlos II. Ben Altabef, Aída, comp. III. Vergara, Mónica Mercedes, comp. IV. Díaz, Sonia B., comp. V. Ben Altabef, Aída, ed. VI. Vergara, Mónica Mercedes, ed. VII. Díaz, Sonia B., ed.

CDD 540.711

XXI CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUIMICA Y QUIMICA INORGÁNICA

14 al 17 de abril de 2019, Tucumán, Argentina.

Aída Ben Altabef ; Mónica Mercedes Vergara y Sonia B. Díaz (*Compiladores*)

ISBN: 978-987-754-185-4.



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

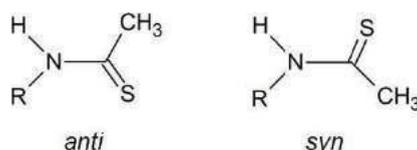
B30 - ANÁLISIS DE LOS EFECTOS DE LOS SUSTITUYENTES EN EL EQUILIBRIO CONFORMACIONAL DE TIOACETANILIDAS FLUORO SUSTITUIDAS

Lezama, J. O. G. y Robles, Norma L.

INQUINOA - CONICET UNT, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán, Av. Independencia 1800, S. M. de Tucumán, Tucumán, Argentina

guy.lezama@gmail.com

INTRODUCCIÓN: La Tioacetanilida es una de las moléculas más pequeñas que posee la entidad C(S)-N-H, similar a la encontrada en tiopéptidos, por lo que ha llamado la atención de diversos grupos de investigación desde hace mucho tiempo. A diferencia de análogos estructurales tales como tioamidas y tiobenzamida, la tioacetanilida no forma óxidos con propiedades hepatotóxicas y recientemente se ha demostrado como un potencial e interesante inhibidor de algunas proteínas específicas. Los estudios conformacionales realizados para tioacetanilida y sus derivados predicen dos conformaciones estables, *syn* y *anti*, que resultan de una rotación en torno al enlace C-N del grupo tioamida -C(S)-N-H.



Se presenta en este trabajo el estudio realizado para *o*, *m*, y *p*-fluorotioacetanilida con el fin de analizar la influencia que ejerce un átomo de halógeno ubicado en distintas posiciones del anillo respecto de las propiedades estructurales y vibracionales del grupo tioamida y sobre el equilibrio conformacional a temperatura ambiente.

RESULTADOS: Se sintetizaron las fluorotioacetanilidas a partir de las correspondientes fluoroacetanilidas usando como agente tionante P₄S₁₀/HMDO y diclorometano como solvente. La reacción se llevó a cabo en un horno microondas y los productos obtenidos fueron caracterizados mediante RMN (¹H y ¹³C), CG/Masas, FT-IR y FT-Raman. El estudio de la superficie de energía potencial y posterior optimización y cálculo de los espectros vibracionales y de RMN se realizó utilizando cálculos químico-cuánticos derivados de la Teoría de Funcionales de la Densidad (B3LYP) con los conjuntos de funciones base 6-311++G(d,p) y 6-311++G(3df,3pd). Los resultados teóricos predicen que los espectros experimentales deberían reflejar la presencia de un equilibrio conformacional entre las formas *syn* y *anti*, siendo el confórmero *anti* el más estable y en una proporción cercana al 90% para los compuestos de la serie. Los espectros experimentales confirman la presencia del equilibrio conformacional, pese a que las intensidades de las señales asignadas a las especies menos estables harían suponer que su proporción teórica fue subestimada.

CONCLUSIONES: El análisis de las señales correspondientes a los modos fundamentales de vibración confirma la presencia de distintas formas en equilibrio. Se establecieron tendencias en las frecuencias observadas, las cuales se analizaron teniendo en cuenta efectos electrónicos de distinta naturaleza y/o interacciones intramoleculares. La presencia del átomo de flúor en el anillo aromático suscita entonces cambios en las propiedades conformacionales y de enlace del grupo tioamida de potencial interés en la química de los compuestos tiocarbonílicos.-