



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE TUCUMÁN

naifq

ASOCIACIÓN ARGENTINA DE
INVESTIGADORES EN FÍSICOQUÍMICA
PERSONERÍA JURÍDICA 2048

XXI CONGRESO ARGENTINO DE FÍSICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA

LIBRO DE RESÚMENES



TUCUMÁN
ARGENTINA



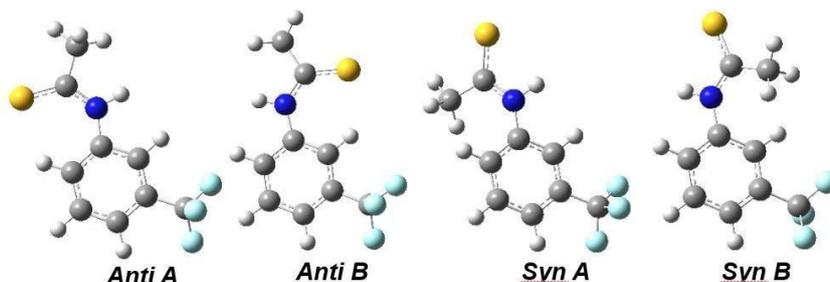
XXI CONGRESO ARGENTINO DE FÍSICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA
TUCUMÁN- ABRIL 2019

B29 - SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y PROPIEDADES VIBROCONFORMACIONALES DE *m*-(trifluorometil)tioacetanilida

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: Una de las moléculas más pequeñas que posee la entidad C(S)-N- H característica en tiopéptidos es tioacetanilida, recientemente reportada como un potencial e interesante inhibidor de algunas proteínas específicas. El reciente análisis de la serie: *o*-, *m*- y *p*-fluorotioacetanilida demostró la existencia de un equilibrio conformacional de los isómeros *anti* y *syn* (respecto de los enlaces N-H y C=S) y una marcada influencia del átomo de Flúor en los modos vibracionales esperados para esta serie conforme varía la posición del halógeno en el anillo aromático. En el presente estudio, el grupo trifluorometilo en posición meta respecto del grupo tioamida posibilitaría encontrar un equilibrio conformacional de las formas a continuación:



Con el objetivo de entender la influencia del grupo CF₃ en las propiedades conformacionales y vibracionales de un derivado de tioacetanilida, se presenta en este trabajo la síntesis y el estudio vibroconformacional de *m*-(trifluorometil)tioacetanilida, cuyas propiedades se contrastarán con las encontradas para la serie monofluorosustituída. De esta forma, será posible corroborar o contrastar las variaciones en las tendencias observadas para dicha serie en función de los efectos electrónicos predominantes en cada caso.

RESULTADOS: La síntesis se realizó en dos etapas: trifluorometilacetanilida se obtuvo por reacción de la correspondiente anilina con acetato de zinc dihidratado en ácido acético como solvente; la posterior tionación de este precursor se realizó utilizando una mezcla P₄S₁₀/HMDO y tolueno como solvente. Ambas reacciones se llevaron a cabo en un horno microondas y los productos obtenidos fueron caracterizados mediante RMN (¹H y ¹³C), CG-Masa, FT-IR y FT-Raman. Se realizó el estudio teórico del análisis de superficie de energía potencial y se obtuvieron los espectros vibracionales y de RMN utilizando cálculos químico-cuánticos derivados de la Teoría de Funcionales de la Densidad (B3LYP).

CONCLUSIONES: El análisis de las señales observadas en los espectros experimentales de las muestras líquidas a temperatura ambiente confirma la presencia de un equilibrio conformacional de los isómeros *anti A* y *syn A*. Se establecieron tendencias en las frecuencias vibracionales observadas teniendo en cuenta efectos electrónicos de distinta naturaleza. –