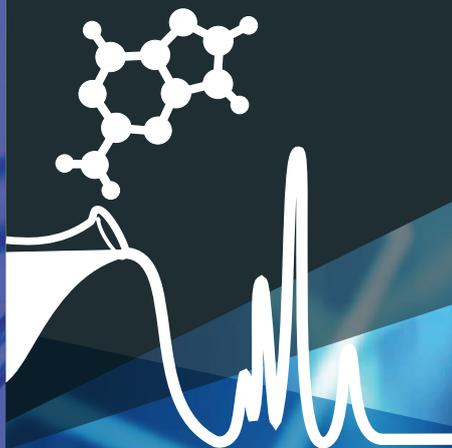


e-book ISBN 978-987-688-210-1



XX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica

Néstor M. Correa y Luis A. Otero

Compiladores

16 al 19 de Mayo de 2017

Ciudad de Villa Carlos Paz, Córdoba, Argentina

UniRío
editora

SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIO VIBRACIONAL DE
P-TRIFLUOROMETILSULFINILANILINA.

Doly M. Chemes^a, Norma L. Robles^b y Edgardo H. Cutin^b

^a Instituto de Química Física, Fac. de Bioq., Qca. y Fcia., Universidad Nacional de Tucumán. San Lorenzo 456, S. M. de Tucumán, Tucumán. República Argentina.

^b INQUINOA – CONICET UNT. Ayacucho 471, S. M. de Tucumán, Tucumán. República Argentina
dolymchemes@gmail.com

Motivación: Nuestro principal interés en el estudio de las N-sulfinilaminas de fórmula general R–N=S=O (R=anillo aromático) con diferentes sustituyentes en el anillo aromático, se centra en sus propiedades estructurales, vibracionales y conformacionales. La presencia de dobles enlaces provee a este tipo de moléculas características cromofóricas que hacen que puedan ser utilizadas como sensores conformacionales. Estos compuestos pueden encontrarse en las formas configuracionales *syn* y *anti* en función de la disposición del enlace S=O con respecto al enlace C–N.

Si bien se han reportado numerosos compuestos pertenecientes a esta familia, poco se conoce acerca de los efectos que provocan diferentes sustituyentes en el anillo aromático sobre los modos vibracionales del grupo funcional N=S=O. En este trabajo presentamos una caracterización utilizando espectroscopias de infrarrojo, Raman y resonancia magnética nuclear, espectrometría de masas y cálculos químico cuánticos a diferentes niveles de aproximación para *p*-trifluorometilsulfinilnilina con el fin de analizar la influencia que ejerce el grupo trifluorometilo en posición *para* al grupo –N=S=O sobre las propiedades estructurales y vibracionales.

Resultados y Conclusiones: *p*-trifluorometilsulfinilnilina es una sustancia altamente higroscópica y corrosiva, obtenida con un rendimiento del 96% a través de la reacción de la *p*-trifluorometilanilina y cloruro de tionilo. Los espectros experimentales revelan la presencia de un único conformero, la forma *syn*, pese a ser la forma estéricamente menos favorable. Estos espectros se compararon con los obtenidos mediante cálculos químicos cuánticos a diferentes niveles de teoría. El análisis de orbitales naturales de enlace (NBO) confirma que pese los impedimentos estéricos, el conformero *syn* es el más estable como consecuencia de interacciones orbitales energéticamente más favorables en esta forma que en la *anti*. En cuanto a la influencia del grupo CF₃ en las frecuencias vibracionales del grupo N=S=O, se observó una disminución en los valores de las frecuencias de los estiramientos simétrico y antisimétrico con respecto al homólogo sin sustituir, la sulfinilnilina. Estos cambios pueden comprenderse al analizar las posibles estructuras de resonancia para esta molécula, considerando cómo los efectos inductivos y mesoméricos determinan que diferentes enlaces químicos se refuercen o debiliten según la posición en la que se encuentre el grupo funcional sustituyente del anillo aromático.-