

## SÍNTESIS Y ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE METANSULFONATO DE TRIFLUOROETIL (METILSULFONILO) $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OSO}_2\text{CH}_2\text{SO}_2\text{CH}_3$

J. E. Galván<sup>1,2</sup>, M. E. Defonsi Lestard<sup>1,2</sup>, M. E. Tuttolomondo<sup>1,2</sup>, S. E. Ulic<sup>3,4</sup> y A. Ben Altabef<sup>1,2</sup>.

<sup>1</sup>Instituto de Química Física. Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia. Universidad Nacional de Tucumán. San Lorenzo 456. T4000CAN Tucumán, Argentina. <sup>2</sup>Instituto de Química del Noroeste Argentino, INQUINOA-CONICET-Tucumán, Argentina. <sup>3</sup>CEQUINOR, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, CC. 962 (1900) La Plata y <sup>4</sup>Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Nacional de Luján, Rutas 5 y 7 (6700) Luján, Argentina.

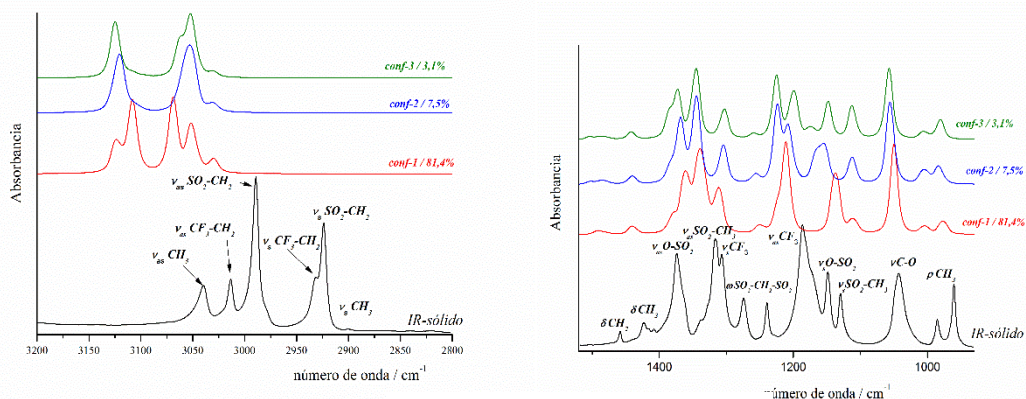
**Introducción:** Como parte de nuestros estudios estructurales,<sup>1-3</sup> conformacionales y vibracionales de sulfonatos covalentes, en este trabajo se presenta la síntesis y el estudio de las propiedades estructurales y vibracionales de  $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OSO}_2\text{CH}_2\text{SO}_2\text{CH}_3$ .

**Objetivos:** Sintetizar y determinar en forma experimental y teórica la estructura y las propiedades conformacionales y vibracionales de  $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OSO}_2\text{CH}_2\text{SO}_2\text{CH}_3$ .

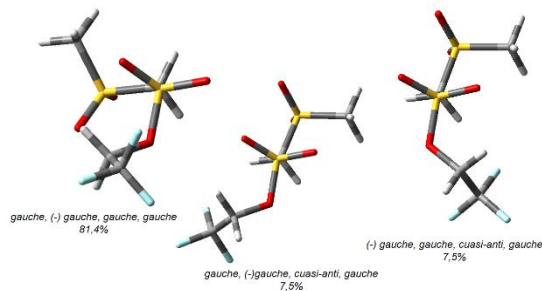
**Síntesis:**<sup>4</sup> Se preparó el intermediario  $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{CH}_2=\text{SO}_2\text{Cl}$ , estable sólo entre  $-30^\circ\text{C}$  y  $-40^\circ\text{C}$ , cuya posterior reacción con trifluoroetanol permite obtener metansulfonato de trifluoroetil (metilsulfonilo).

**Estudios teóricos estructurales y conformacionales:** Usando el programa Gaussian03,<sup>5</sup> se realizaron curvas de variación de la energía potencial a través de la variación de los ángulos diedros CCOS; COSC; OSCS y SCSC; los resultados de ellas predicen 10 diferentes conformaciones de las cuales 6 son estables (dos de ellas imagen especulares de otras dos) con diferencias de energía libre ( $\Delta G$ ) menores a  $3\text{ kJ mol}^{-1}$ .

Se realizó un análisis de los espectros FTIR y Raman (**Figura 1**) y, con los resultados de los datos teóricos vibracionales, se pudieron identificar tres de las 6 conformaciones estables que presentan una forma *gauche* como puede verse en la **Figura 2**.



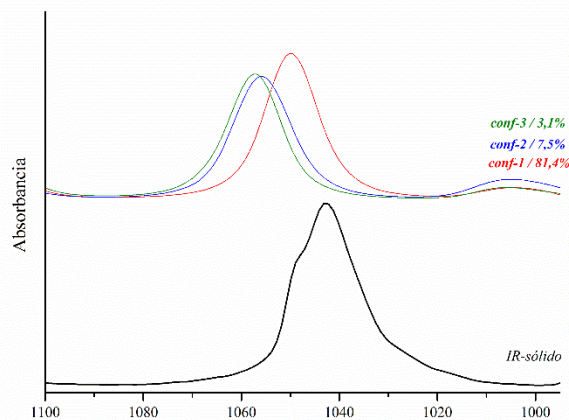
**Figura 1**



**Figura 2**

Estudios vibracionales y teóricos:

En la **Figura 1** se presentan los espectros de infrarrojo teóricos y experimentales del  $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OSO}_2\text{CH}_2\text{SO}_2\text{CH}_3$ . La molécula presenta 57 modos de vibración, todos activos en IR y Raman. En la **Figura 3** se comparan los espectros IR observados y calculados en la región del estiramiento C-O, donde se puede ver que la banda ancha centrada en  $1042\text{ cm}^{-1}$  se debe a la contribución de los diferentes conformeros más estables (**Figura 2**).



**Figura 3**

Referencias:

- 1- Tuttolomondo, M. E.; Navarro, A.; Peña, T, P. E.; Varetto, E. L.; Hayes, S. A.; Wann, D. A.; Robertson, H. E.; Rankin, D. W. H.; Ben Altabef, A. J. Phys. Chem. A 2007, 111, 9952-9960.
- 2- M. E. Tuttolomondo, A. Navarro, T. Peña, E. L. Varetto, S. F. Parker y A. Ben Altabef. J. Phys. Chem., 2009, 113 (29), 8401-8408.
- 3- M. E. Defonsi Lestard, L.A. Ramos Guerrero, M.E. Tuttolomondo, S. E. Ulic and A. Ben Altabef, Vib. Spectrosc., 2012, 59, 40-46.
- 4- Y. Fulmer Shealy, Charles A. Krauth, Robert F. Struck, John A. Montgomery, J. Med. Chem., 1983, 26, 1168.
- 5- Gaussian 03, Revision B.01, Gaussian Inc.