

enlace C₂-N₃ (1460-1410 cm⁻¹). Según los cálculos, la componente estructural de las especies (conformación y longitudes de enlace) sería determinante para justificar la diferencia en las temperaturas de reacción.

Conclusiones.

Existe una muy buena correlación de los modos vibracionales (experimentales y calculados), tanto para las especies azufradas como para las oxigenadas. En la fase sólida se observa una cantidad menor del tautómero ol/tiol. La presencia del átomo de oxígeno, tiene una marcada influencia en la estructura y en el espectro vibracional, lo que estaría directamente relacionado a su comportamiento térmico en fase gaseosa.

Referencias

- [1] F. Fülöp, G. Bernáth, K. Pihlaja, *Adv. Heterocycl. Chem.* **1997**, 69, 349-477.
- [2] C.Y. Panicker, H.T. Varghese, K.R. Ambujakshan, S. Mathew, S. Ganguli, A.K. Nanda, C. Van Alsenoy, *J. Raman Spectrosc.* **2009**, 40, 1262-1273.
- [3] V. Alagarsamy, D. Shankar, V.R. Solomon, R.V. Sheorey, P. Parthiban, *Acta Pharm.* **2009**, 59, 75-88.
- [4] C.A. Mosley, T.M. Acker, K.B. Hansen, P. Mullasseril, K.T. Andersen, P. Le, K.M. Vellano, H. Bräuner-Osborne, D.C. Liotta, S.F. Traynelis, *J. Med. Chem.* **2010**, 53, 5476-90.
- [5] W.J. Peláez, Z. Szakonyi, F. Fülöp, G. Yranzo, *Tetrahedron* **2008**, 64, 1049-1057.
- [6] W.J. Peláez, A.G. Iriarte, Z. Szakonyi, F. Fülöp, G.A. Argüello, *J. Anal. Appl. Pyrolysis* **2012**.
- [7] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J.J.A. Montgomery, J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, O. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, , *Gaussian, Inc., Wallingford CT* **2010**.