

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA



Tesis Doctoral

Estudio vibracional, conformacional y teórico de moléculas sulfenilcarbonílicas, sulfeniltiocarbonílicas y relacionadas

Dirección

Profesor Dr. Dr. Carlos Omar Della Védova

Codirección

Profesora Dra. Rosana Mariel Romano

YENY ALEXANDRA TOBÓN CORREA

La Plata, Argentina
2008

*A mis padres y hermanos
A mi esposo*

Este trabajo de tesis doctoral se realizó en el Centro de Química Inorgánica CEQUINOR (CONICET-UNLP), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, bajo la dirección del Profesor Dr. Dr. Carlos O. Della Védova y la codirección de la Profesora Dra. Rosana M. Romano.

*“Para el logro del triunfo siempre ha sido indispensable
pasar por la senda de los sacrificios.”*

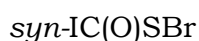
Simón Bolívar
(1783-1830)

Estudios Realizados en este trabajo

Primera parte Estudios fotoquímicos en matrices

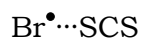
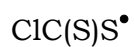
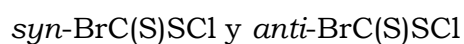
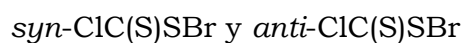
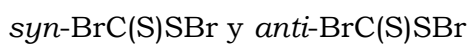
Reacciones fotoquímicas OCS + XY (X,Y = Cl, Br, I)

Especie nueva caracterizada:



Reacciones fotoquímicas CS₂ + XY (X,Y = Cl, Br, I)

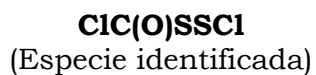
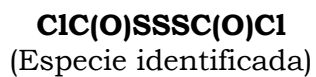
Especies nuevas caracterizadas:



Fotoquímica del ClC(O)OCH₂CH₃

Estudios Realizados en este trabajo

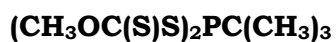
Segunda parte Síntesis y estudio vibracional, conformacional y teórico



Estudios Realizados en este trabajo

Perspectivas

Los compuestos listados a continuación surgieron como derivación de este trabajo de tesis doctoral y se encuentran en proceso de estudio:



Agradecimientos

Agradezco en primer lugar a Dios por haberme dado las fuerzas necesarias para el emprendimiento de este objetivo, por permitirme superar todas las pruebas y fracasos, por haber colocado en mi camino las personas que me guiaron científicamente, así como aquellas que me brindaron el apoyo afectivo, moral, y psicológico que necesité durante todo este periodo de tiempo. Gracias infinitas por la perseverancia, cualidad sin la cual no habría sido posible encontrar las vías para el desarrollo científico de este trabajo.

Agradezco al Profesor Dr. Carlos O. Della Védova, director del Programa Regional de Química, por dirigir este trabajo de tesis, por permitirme la realización de este trabajo en su grupo de investigación y por el apoyo y ayuda que me brindó especialmente en las discusiones surgidas durante las fases más duras del desarrollo de esta tesis doctoral. Debo agradecerle también por su optimismo y apoyo para la culminación exitosa de este trabajo y la motivación brindada para la continuación de la labor investigativa.

A la Profesora Dra. Rosana Romano, por su ayuda invaluable como codirectora de esta tesis, por las largas y profundas discusiones científicas y el apoyo académico recibido durante la realización del trabajo. Debo reconocer a ella como el motor impulsor de este trabajo doctoral. Sus críticas, a veces duras, contribuyeron con mi desarrollo científico, su capacidad y amplia experiencia en los temas relacionados con esta tesis doctoral hicieron que los proyectos emprendidos culminaran con éxito y que se abrieran amplios horizontes de estudios

futuros y muchas gracias además por sus brillantes ideas que siempre ayudaron a la resolución de los problemas que se presentaron.

Al Profesor Dr. Enrique Baran, quien como director del centro en los primeros años de la realización de este proyecto, posibilitó el inicio del desarrollo de esta tesis doctoral en el Centro de Química Inorgánica, CEQUINOR.

Al DAAD (Deutscher Akademischer Austausch Dienst) por otorgarme la Beca doctoral por medio del Programa Regional de Química en la República Argentina, dirigido por el Dr. Della Védova, para realizar estos estudios en la Universidad Nacional de La Plata y por permitirme la realización de 6 meses de investigación en Alemania. Agradezco especialmente al Sr. Wolfgang Gairing, y a la Sra. Elfriede Firzloff, por su labor de apoyo y ayuda constante, por escucharme y sobre todo por creer en mi.

A las siguientes instituciones que apoyan económicamente al grupo de investigación. Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Fundación Antorchas, Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (CIC), Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica y Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata.

A la Profesora Dra. Eva-Marie Hey-Hawkins, de la facultad de química y mineralogía de la Universidad de Leipzig, República de Alemania, por aceptarme y posibilitarme la realización de la pasantía de investigación en su laboratorio, por su constante asistencia y ayuda, por su profesionalismo, carisma y respeto que siempre me brindó.

A la Profesora Dra. Gloria Elena Tobón por incentivar me en la postulación para la Beca y en la realización de este trabajo en Argentina, por sus sabias palabras, por creer en mi, por haberme formado durante mi carrera como Química Farmacéutica en la Universidad de Antioquia, Colombia y por haberme dado una lección de vida que me ayudó a madurar y a emprender mis objetivos con responsabilidad y respeto.

A la Profesora Gloria Holguín y la Tecnóloga Química Nohelia Gómez de la Universidad de Antioquia, Colombia, por su amistad y cariño, por su apoyo constante, por creer en mí, por inculcarme la responsabilidad dentro de la formación que me brindaron y por incentivar me en la elección de una vida investigativa. A la profesora Gloria Holguín, así como a los profesores Rafael Salamanca, Óscar Flórez y Cecilia Gallardo por permitirme trabajar con ellos en sus investigaciones durante mis últimos años como estudiante de la facultad, aprender de sus experiencias y tomarle amor a la investigación.

Al Profesor Dr. Alejandro Martínez de la Universidad de Antioquia, Colombia, por enseñarme los primeros pasos en la investigación desde mis comienzos como alumna de la Facultad de Química Farmacéutica, permitiéndome trabajar en su grupo de investigación durante prácticamente toda mi carrera de grado, aportándome conocimientos y amor por la labor investigativa.

Al Profesor Dr. Anthony J. Downs por su ayuda en las publicaciones compartidas y sus comentarios y opiniones siempre valiosas para las mismas.

Al Profesor Dr. Oscar Piro por su ayuda y la medición de las estructuras cristalinas y por su amabilidad y siempre pronta respuesta.

Al Profesor Dr. Héctor E. Di Loreto por la facilitación de algunos reactivos y por su ayuda en la publicación compartida.

Al Profesor Dr. Roland Boese y su equipo de trabajo de la Universidad de Essen, República de Alemania, especialmente al Ingeniero Dieter Blazer por la medición de la estructura cristalina a bajas temperaturas empleando el procedimiento de cristalización *in situ*.

A la Dra. Joanna Czarnowski y al Sr. Zdzislaw Czarnowski por su amistad y optimismo contagioso, por su cariño y respeto sin merecerlo.

Al Ingeniero Daniel Turne, Ingeniero Lito Molina y el Dr. Néstor Massa por su amistad y ayuda profesional cada uno de acuerdo a sus labores particulares.

Al Dr. Jorge Jíos, Dra. Sonia Ulic, Dr. Mauricio Erben por sus consejos y el apoyo brindado en estos años de trabajo. De igual manera quiero agradecerle al Dr. Adolfo Fantoni.

Al personal del CEQUINOR, especialmente a las señoras Maria Cristina Castelli y Adriana Beatriz Marano. Así mismo a la Sra. Mabel Alderete por su cariño y amistad durante estos años. Del mismo modo agradezco al señor Néstor Sbariggi y especialmente al señor Jorge Poche por su ayuda en las mediciones de Raman.

A mis compañeros de tristezas y alegrías en el llamado “subsuelo” Lorena Picone, Mariana Geronés, Arlés Gómez, Valeria Arce, Mirari Arancibia y Nadia Villar, por aguantar mis momentos de locura, por aconsejarme y darme valor y por todos los momentos compartidos dentro y fuera del laboratorio. A Mirari muchas gracias por su valentía. A Isabel Henao, amiga y compañera de vida y de estudio. A Nahir Dugarte, amiga y compañera, por su apoyo y ayuda, por aguantarme, se que es difícil pero como bien decimos hay cosas peores. Así mismo quiero agradecerle a Laura Nieto por su ayuda y su amistad y a Norma Buceta, Ximena Morales, Fabián Arboleda, Sonia Torrico, Ana Iriarte, Luís Ramos, Melina Cozzarin y Marlene Cuaquira, con quienes he compartido diversos momentos y circunstancias en mi trabajo.

A mis amigos de siempre, Lorena Correa y Héctor Alarcón, ustedes siempre serán mis amigos del alma, en las buenas y en las malas. A Dora Benjumea, su esposo Mario Víctor y a Rubby Terranova, por su amistad incondicional, por no perder el contacto durante estos años y siempre brindarme apoyo y desearme la mejor de las suertes. Por que se que todos ustedes se alegran de corazón por mis triunfos.

Agradezco al grupo de trabajo de la profesora Hey-Hawkins por su hospitalidad y su asistencia, especialmente a la Sra. Lisbeth Mendoza

por su amistad y su ayuda personal y académica, por su esfuerzo y apoyo constante para que mi trabajo en Leipzig diera buenos frutos. Al Dr. Santiago Gómez-Ruiz, por las valiosas discusiones y la determinación de las estructuras cristalinas, su apoyo y sobretodo por su amistad, gracias Santi por el “Schlenk de la suerte”. A la Dra. Beatriz Gallego, Dra. Alexandra Hildebrand y el Sr. Mike Hildebrand, por su amistad y su ayuda personal y académica durante mi estadía en Leipzig, al Dr. Peter Lönnecke, Sra. Annelies Scholz y Sra. Regina Zäbe por las mediciones de estructura cristalina, espectros IR y espectros RMN respectivamente. Así mismo un agradecimiento a la Sra. Ana Maria Valean, Sra. Ioana Grossu, Sra. Iudit Filip, Sra. Rebeca Herrero y Dra. Rebeca Reguillo, por los buenos momentos compartidos en Leipzig dentro y fuera del laboratorio.

A mis amigos en Argentina Ofelia Huergo y su familia, Graciela Wamba y Amanda Lede, Gustavo Cheves, Susana García y Ulises Esperoni, por todo el apoyo recibido, su cariño, y los buenos ratos compartidos.

Al Dr. Ulrich Mager, a la Sra. Georgine Schmid Pusterla y Sra. Daniela Krause por la ayuda recibida durante estos años en Argentina.

A la Dra. Silvia Puccini gracias por la ayuda profesional que me brindó, con su ayuda fue posible superar obstáculos personales y profesionales, gracias por ayudarme a trazar metas y vislumbrar la mejor manera de afrontar las situaciones difíciles.

A mis padres Inés y Rogelio por su apoyo incondicional y su estímulo permanente, a quienes amo profundamente. A mi madre, el ser más hermoso de la tierra, a quien admiro por su tenacidad y pujanza, gracias por tus sacrificios y tu amor. A mi padre perdón por mis años de ausencia, perdón por tu soledad, quiero que sepas que te amo, te admiro y te respeto. Por ello esta tesis va dedicada ustedes.

A mis hermanos Edwin y Julieth los amo con todo mi corazón, gracias por cubrir mi ausencia y brindarle apoyo a nuestros padres.

A mi familia política, Doña Liliana y Don Arturo, abuelos, tíos, primos y sobrinos, infinitas gracias por el amor que me han demostrado, por haberme abierto las puertas de su casa y de su corazón, por tratarme como una hija. Les pido perdón por apartar a Mauricio de su lado, por llevarlo a tierras lejanas sin posibilidad de verlo en muchos años, es mi culpa y espero poder enmendarlo algún día.

Finalmente y de manera muy especial a mi esposo, Mauricio Fletcher, este triunfo es más tuyo que mío, tu representas el amor, la cordura, y la persistencia. Gracias por brindarme el apoyo afectivo durante todos estos años, gracias por acompañarme y estar conmigo durante mi estadía en Alemania, gracias por sacrificar tus sueños, tus estudios, tu trabajo y tu familia por estar conmigo. Sin tu ayuda yo habría sucumbido ante el primer obstáculo que se me presentara, pero tu con tu amor y tu sensatez me ayudaste a levantarme y enfrentar el presente, me diste lecciones de madurez y habilidad para manejar las situaciones difíciles, se que ha sido duro el camino mi amor pero al final de las espinas viene un jardín de rosas. Perdóname por mi insensatez, mi inmadurez y mis malos ratos, por llevar mis problemas de trabajo a casa y hacerte parte de ellos. Por todo esto, esta tesis, este triunfo, esta dedicado a ti. Sólo espero que la vida nos premie con muchos años juntos llenos de felicidad y que podamos construir el hogar que siempre hemos deseado.

Gracias a aquellos que no menciono pero que han contribuido en uno u otro modo a la realización de este trabajo, bien sea con un apoyo científico o personal.