

ESTUDIO Y CARACTERIZACIÓN ESPECTROSCÓPICA DE UNA NUEVA β -AMINOENONA

Eliana Jios,¹ Ena G. Narvaez,¹ Edeimis Espitia¹, Lorena E. Salvador¹, Sonia E. Ulic¹, Jorge L. Jios²

¹ CEQUINOR, Blvd. 120 1465, La Plata. ²Laboratorio UPL, Cno. Centenario e/505 y 508, Gonnet.

Correo electrónico de contacto: elianajios@quimica.unlp.edu.ar

Las β -aminoenonas son compuestos orgánicos que presentan en su estructura tres grupos funcionales principales sucesivos: un amino, un alqueno y un carbonilo, $\text{HN}-\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{O}$, (Figura 1). Estas moléculas despiertan gran interés por su versatilidad y, aunque en algún tiempo se utilizaban como intermediarios de síntesis, en la actualidad se ha descubierto su potencial bioactividad. Además, en los últimos años se han investigado como posibles agentes para aplicaciones en química medicinal. [1]

En este trabajo se presenta una nueva β -aminoenona, (Z)-3-(isopropilamino)-1-(5-cloro-2-hidroxi-4-metilfenil)-4,4,4-trifluoro-2-buten-1-ona (**b**), la cual se obtuvo mediante la reacción de 6-cloro-7-metil-2-trifluorometilcromona (**a**) e isopropilamina en etanol a temperatura ambiente por 2 horas (Figura 1). El compuesto fue caracterizado por espectroscopia vibracional (IR y Raman) y la asignación de los principales modos normales se realizó con la asistencia de cálculos teóricos.[2] En concordancia con resultados obtenidos para moléculas similares,[3] se observó un desplazamiento de la banda asociada al estiramiento del grupo carbonilo hacia menores números de onda (1576 cm^{-1}). Este comportamiento se atribuye a hecho de que en este caso el $\text{C}=\text{O}$ participa en interacciones intramoleculares de tipo puente de hidrógeno con los grupos $-\text{OH}$ y $-\text{NH}$ (Figura 2). Adicionalmente, se obtuvieron los espectros electrónicos experimentales y teóricos y se asignaron las principales bandas de absorción.

La determinación estructural del compuesto se llevó a cabo mediante estudios de espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN) de ^1H , ^{13}C y bidimensionales (COSY y HSQC), complementados por análisis de espectrometría de masas (EM).

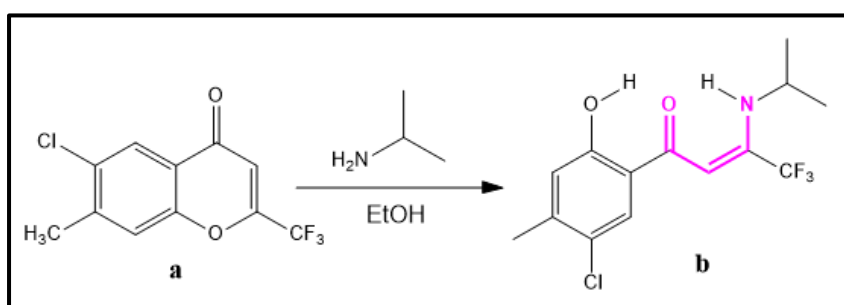


Figura 1. Vía de síntesis de la β -aminoenona de interés.

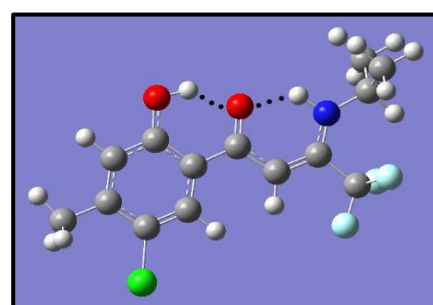


Figura 2. Interacción bifurcada por puente de hidrógeno del $\text{C}=\text{O}$.

Referencias

- [1] Edafiogho, I.O.; Kombian, S.B.; Ananthalakshmi, K.V.; Salama, N.N.; Eddington, N.D.; Wilson, T.L.; Alexander, M.S.; Jackson, P.L.; Hanson, C.D. *J. Pharm. Sci.*, **2007**, *96*, 2509–2531.
[2] Fish, M.J.; et al., *Gaussian 03*, **2004**.
[3] Rocha, M.; Gil, D. M.; Echeverría, G. A.; Piro, O. E.; Jios, J. L.; Ulic, S.E. *J. Fluor. Chem.*, **2018**, *208*, 36-47.