

SÍNTESIS Y ESTUDIO DE UN NUEVO DERIVADO DE CROMONA

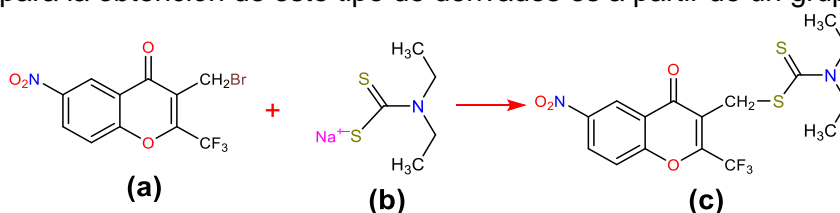
Ena G. Narváez,¹ Eliana Jios,¹ Edeimis Espitia,¹ Lorena E. Salvador,¹ Sonia E. Ulic,¹ Jorge L. Jios²

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

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

La modificación estructural de núcleos derivados del benzopirano, como las cromonas, mediante la introducción de grupos funcionales, tiene como objetivo mejorar las propiedades químicas y biológicas de estos sistemas. El interés en estos compuestos radica en sus múltiples aplicaciones, que incluyen áreas como la farmacología, la agroquímica, y la química organometálica. [1] En este trabajo se presenta la modificación de un anillo cromona mediante la adición de un grupo ditiocarbamato y la posterior caracterización del compuesto obtenido.

La vía sintética más común para la obtención de este tipo de derivados es a partir de un grupo haloalquilo con CS₂ y aminas primarias o secundarias.[2] Sin embargo, en este caso se ha empleado una ruta alternativa (Esquema 1) asociada a la reacción de la 3-bromometil-6-nitro-2-trifluorometilcromona (a) con la sal de sodio del ácido N,N-dietilditiocárbamico (b).



Esquema 1. Síntesis de dietilditiocarbamato de 3-(6-nitro-2-trifluorometilcromonil)metilo (c).

El nuevo compuesto obtenido, dietilditiocarbamato de 3-(6-nitro-2-trifluorometilcromonil)metilo (c), se aisló, purificó y caracterizó mediante espectroscopia IR, Raman y UV-vis. Además, se obtuvieron cristales adecuados para su elucidación estructural mediante difracción de rayos-X en monocristal.

La asignación tentativa de los espectros experimentales fue asistida mediante cálculos químico-cuánticos. Por otro lado, a partir de la resolución de la estructura cristalina se determinó que la celda unitaria está constituida por dos moléculas similares en conformación, pero independientes por unidad asimétrica (Figura 1). Las diferencias más importantes entre las dos estructuras corresponden al valor del ángulo diedro C1-C2-C11-S1 y la orientación del grupo -CF₃.

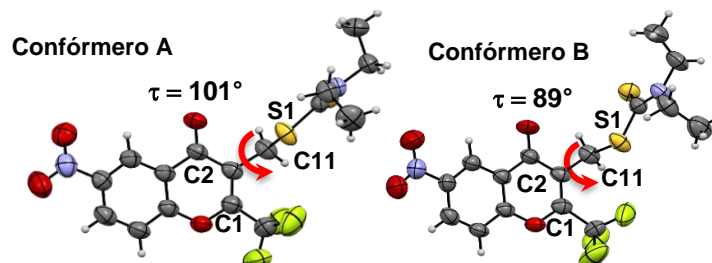


Figura 1. Estructuras conformacionales presentes en la celda unitaria.

Referencias

- [1] Reis, J.; Gaspar, A.; Milhazes, N.; Borges, F., *J. Med. Chem.*, **2017**, 60, 7941–7957,
- [2] Rubino, F.M.; Mrema, E.J.; Colosio, C., *Encycl. Food Saf.*, **2014**, 5–10,