

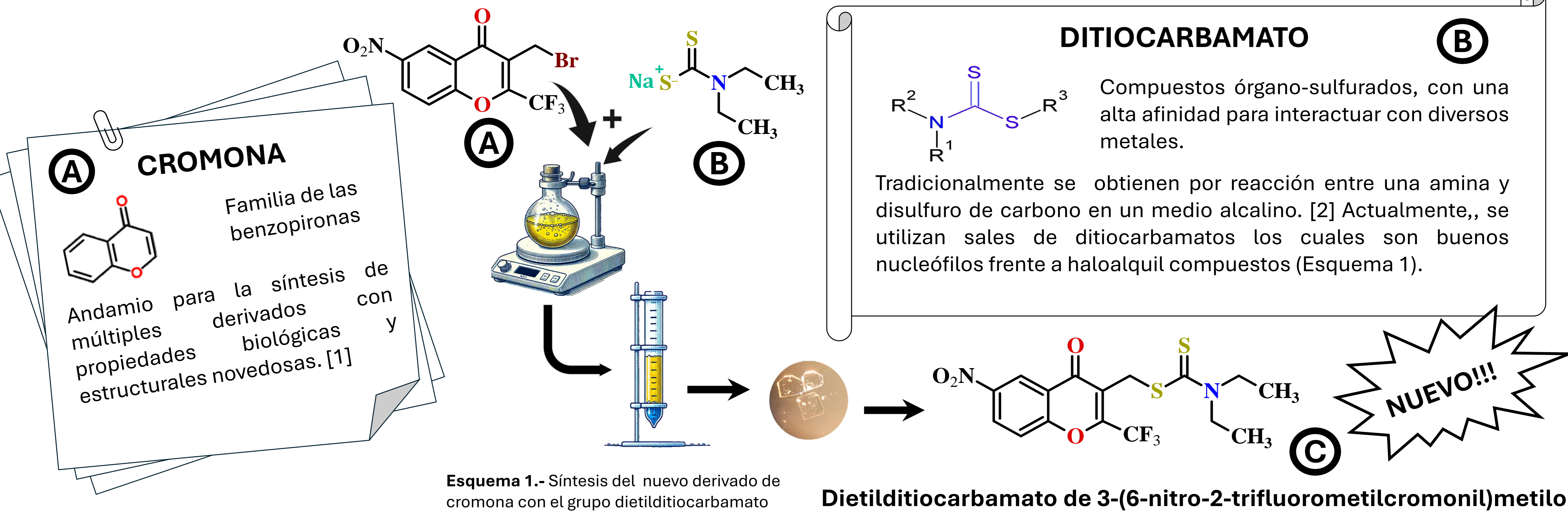
# SÍNTESIS Y ESTUDIO DE UN NUEVO DERIVADO DE CROMONA

Ena G. Narváez,<sup>1</sup> Eliana Jios,<sup>1</sup> Edeimis Espitia,<sup>1</sup> Lorena E. Salvador,<sup>1</sup> Sonia E. Ulic,<sup>1</sup> Jorge L. Jios<sup>2</sup>

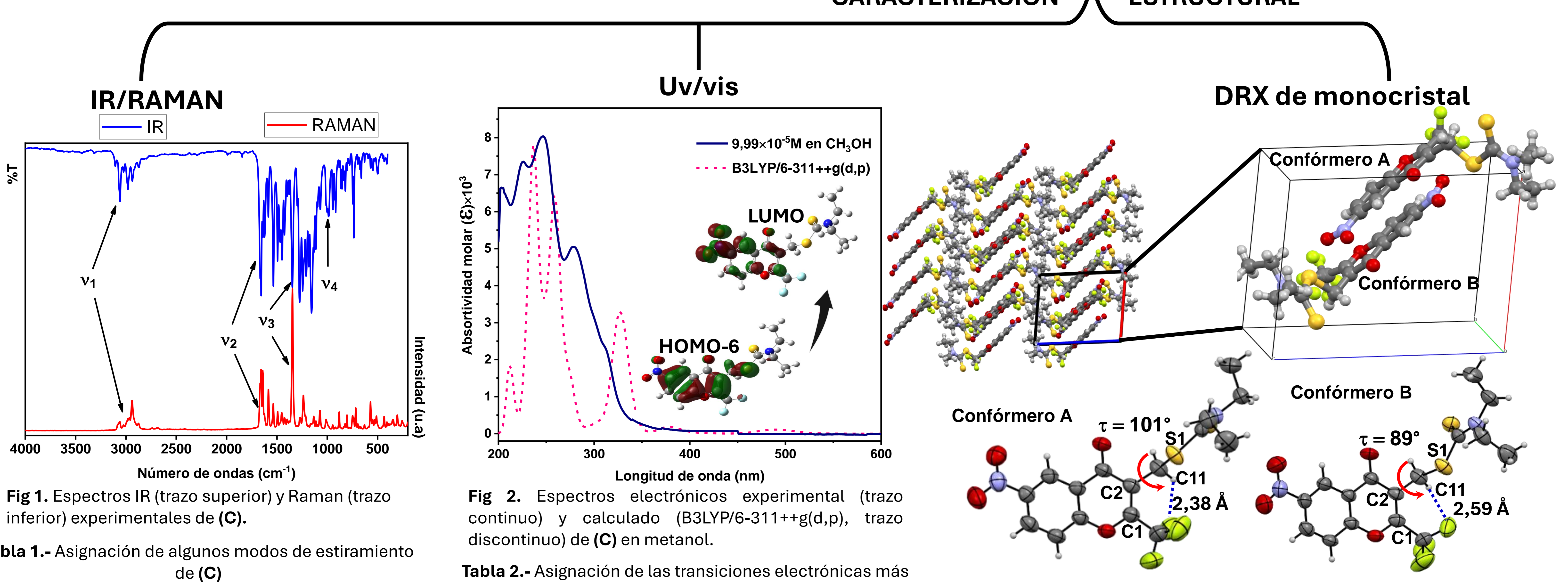
<sup>1</sup> CEQUINOR, Blvd. 120 1465, La Plata, <sup>2</sup> Laboratorio UPL, Cno. Centenario e/ 505 y 508, Gonnet

[gabrielanarvaez@quimica.unlp.edu.ar](mailto:gabrielanarvaez@quimica.unlp.edu.ar)

## INTRODUCCIÓN Y METODOLOGÍA



## RESULTADOS Y DISCUSIONES



**Tabla 1.-** Asignación de algunos modos de estiramiento de (C)

Modo	IR <sup>a,b</sup>	Raman <sup>a,c</sup>	Asignación
v <sub>1</sub>	3055 (md)	3060 (6)	v (C-H)
v <sub>2</sub>	1663 (mf)	1666 (33)	v (C=O)
v <sub>3</sub>	1347 (mf)	1346 (100)	v (C-NO <sub>2</sub> )
v <sub>4</sub>	1001 (md)	---	v (C=S)

a: cm<sup>-1</sup>; b: md (muy débil), mf (muy fuerte); c: intensidad (u.a.)

Los espectros IR y Raman experimentales se presentan en la **Fig 1.** y la asignación de los estiramientos más característicos en la **Tabla 1.** Las bandas en 1347 (IR) y 1346 cm<sup>-1</sup> (Raman) ambas de mayor intensidad, se asignan al estiramiento C-NO<sub>2</sub>. Además, se identificó en IR la absorción correspondiente al estiramiento C=S, en 1001 cm<sup>-1</sup>. El desplazamiento de esta banda a menores frecuencias puede atribuirse a la participación de este grupo en interacciones intra e intermoleculares.

**Tabla 2.-** Asignación de las transiciones electrónicas más relevantes de (C)

Experimental (nm)	Calculado (nm)	Asignación
224	237	HOMO-6→LUMO+2
<b>247</b>	<b>258</b>	<b>HOMO-6→LUMO</b>
279	274	HOMO-3→LUMO+1
---	490	HOMO→LUMO

A partir de las transiciones electrónicas calculadas se realizó la asignación tentativa de las principales bandas de absorción (**Tabla 2**). La banda más intensa en 247 nm (**Fig 2**), correspondiente a la a la transición HOMO-6 → LUMO, se origina por excitaciones π → π\* en el anillo cromona, -NO<sub>2</sub> y CH<sub>2</sub>-S. Por otro lado, el cálculo predice muy baja intensidad para a transición HOMO → LUMO y la misma no fue observada experimentalmente.

**Fig 3.** Empaquetamiento cristalino de (C) (superior) y estructuras conformacionales presentes de la celda unitaria (inferior).

La resolución de la estructura cristalina determinó que la celda unitaria está constituida por dos moléculas similares en conformación, pero independientes por unidad asimétrica (**Fig 3**). Las diferencias más importantes entre las dos estructuras corresponden al valor del ángulo diedro C1-C2-C11-S1 (101° y 89°) y a la orientación del grupo -CF<sub>3</sub>.

## CONCLUSIONES

Se sintetizó un nuevo derivado de cromona que contiene el grupo ditiocarbamato. Es parte de una serie de moléculas obtenidas mediante la ruta alternativa (sal de sodio de dietilditiocarbamato). Los resultados espectroscópicos obtenidos son consistentes con los observados en las otras moléculas. Presenta dos estructuras conformacionales similares pero independientes. En ambos conforméromos se observa una interacción CF...HC (**Fig 3**) que puede considerarse como puente de hidrógeno débil (2,38 a 2,59 Å; 128° - 101°).

## AGRADECIMIENTOS:

Los autores agradecen al Centro de Química Inorgánica "Dr. Pedro J. Aymonino" (CEQUINOR), al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), y a la Universidad Nacional de La Plata.

## BIBLIOGRAFÍA

- [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,