

CARACTERIZACIÓN ESPECTROSCÓPICA Y DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE UNA NUEVA β -AMINOENONA

Eliana Jios,¹ Manuela Bueno Quintas,¹ 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 se caracterizan por contener, en su esqueleto principal, tres grupos funcionales muy conocidos: amino, doble enlace y carbonilo con la estructura $N-C=C-C=O$. Estas moléculas se han utilizado para la síntesis de compuestos de coordinación con iones metálicos, debido a que pueden actuar como ligandos mono, bi e incluso tridentados [1]. Además, en los últimos años se han investigado como posibles agentes para aplicaciones en química medicinal [2].

En este trabajo se presenta una nueva β -aminoenona, (Z)-4-cloro-4,4-difluoro-1-(2-hidroxifenil)-3-(isopropilamino)-2-butenona (**b**). Esta se obtuvo a partir de la reacción de 2-(clorodifluorometil)cromona (**a**) e isopropilamina utilizando etanol como solvente, a temperatura ambiente por 2 horas (Figura 1). El compuesto fue caracterizado mediante espectroscopia vibracional (IR y Raman) y los principales modos normales de vibración fueron asignados con la asistencia de cálculos teóricos. Asimismo, se registraron los espectros electrónicos experimentales y las principales bandas de absorción fueron asignadas sobre la base de los resultados obtenidos mediante cálculos teóricos.

La estructura cristalina del compuesto se resolvió por DRX de monocristal. Además, se completó la caracterización con estudios de resonancia magnética nuclear (RMN) de 1H , ^{13}C y bidimensionales (COSY y HSQC), y análisis de espectrometría de masas (EM).

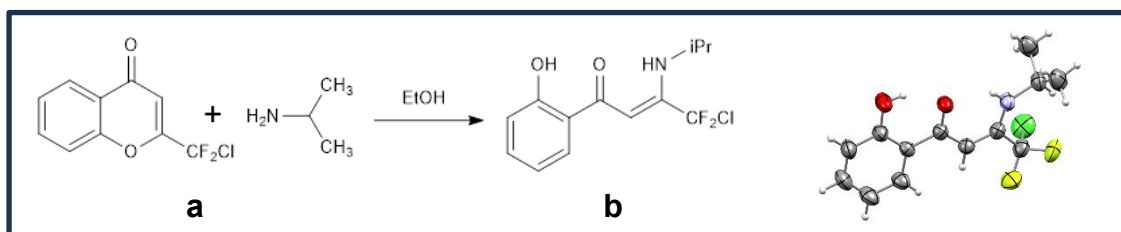


Figura 1. Síntesis de la β -aminoenona de interés junto con la estructura resuelta por DRX.

REFERENCIAS

- [1] Doherty, S.; Errington, R. J.; Housley, N.; Ridland, J.; Clegg, W.; Elsegood, M. R. J. *Organometallics*, **1999**, 18(6), 1018.
- [2] Edafiohgo, 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.