

SÍNTESIS Y ESTUDIO DE UNA NUEVA TIOCROMONA

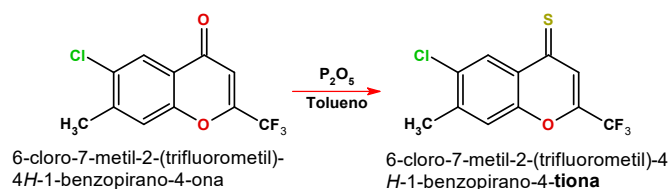
Ena Narváez,¹ Edeimis Espitia,¹ Delfina Martín,¹ Sonia Ulic,¹ Jorge Jios²

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

El interés por los compuestos organosulfurados ha ido en aumento debido a su reactividad y a sus aplicaciones en diferentes áreas como la medicina, la síntesis orgánica, la industria del caucho y la agroindustria, entre otras [1]. En este contexto, las tiocromonas resultan particularmente atractivas debido a sus propiedades electrónicas y a su potencial actividad biológica.

El reactivo de Lawesson y el pentasulfuro de fósforo (P_2S_5) son los reactivos más empleados para la tionación de grupos carbonilo. La síntesis de esta nueva tiocromona, 6-cloro-7-metil-2-(trifluorometil)-4*H*-1-benzopirano-4-tiona, se llevó a cabo mediante la reacción de 6-cloro-7-metil-2-(trifluorometil)-4*H*-1-benzopirano-4-ona con P_2S_5 , en tolueno, a 120 °C durante 4 h (Esquema 1) [2]. El producto obtenido fue recrystalizado en hexano, obteniéndose cristales adecuados para su caracterización mediante espectroscopia vibracional (IR-Raman), electrónica y DRX de monocristal.



Esquema 1.- Reacción de síntesis de la 6-cloro-7-metil-2-(trifluorometil)-4*H*-1-benzopirano-4-tiona

La asignación de los principales modos vibracionales y de las transiciones electrónicas se llevó a cabo con la asistencia de cálculos químico-cuánticos. A partir del empaquetamiento cristalino, se realizó el análisis de la superficie de Hirshfeld. Las interacciones de apilamiento $\pi \cdots \pi$ (Fig. 1) resultaron ser las responsables del empaquetamiento cristalino, predominando el carácter dispersivo de los contactos (Tabla 1).

Tabla 1.- Contribución de las distintas energías (kJ/mol) en las interacciones $\pi \cdots \pi$.

	R	E _{ele}	E _{pol}	E _{dis}	E _{rep}	E _{tot}
	5.34	-12.89	-2.14	-55.43	34.62	-42.10
	4.13	-15.72	-2.94	-68.25	44.33	-50.85

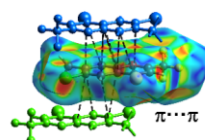


Fig. 1.- Interacciones de apilamiento $\pi \cdots \pi$ y superficie de Hirshfeld

REFERENCIAS

[1] Santos C.; Silva A. *Chem. Rec.* **2025**, 25, 1 – 39

[2] Usachev B.; Shafeev M.; Sosnovskikh V. *Russ. Chem. Bull.* **2004**, 53, 2285 - 2292