



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA

CEQUINOR



CONICET

U N L P

# 6, 7- Dinitro-2-(trifluorometil)- $\alpha$ -naftocromona: síntesis, caracterización y estudio de las interacciones moleculares

Espitia Cogollo Edeimis,<sup>1</sup> Piro Oscar E.,<sup>2</sup> Echeverría Gustavo A.,<sup>2</sup> Ulic Sonia E.<sup>1,3</sup> y Jios Jorge L.<sup>4,5</sup>

<sup>1</sup>CEQUINOR-CONICET. Dpto. de Química, Fac. Cs. Exactas, UNLP, Bv. 120 N° 1465 (1900) La Plata, Argentina.

<sup>2</sup>IFLP-CONICET. Dpto. de Física, Fac. de Cs. Exactas, UNLP, CC. 67 (1900) La Plata, Argentina.

<sup>3</sup>Dpto. Cs. Básicas, UNLu, Rutas 5 y 7 (6700) Luján, Argentina.

<sup>4</sup>Laboratorio UPL (UNLP-CIC), Camino Centenario e/505 y 508, (1897) Gonnet, Argentina.

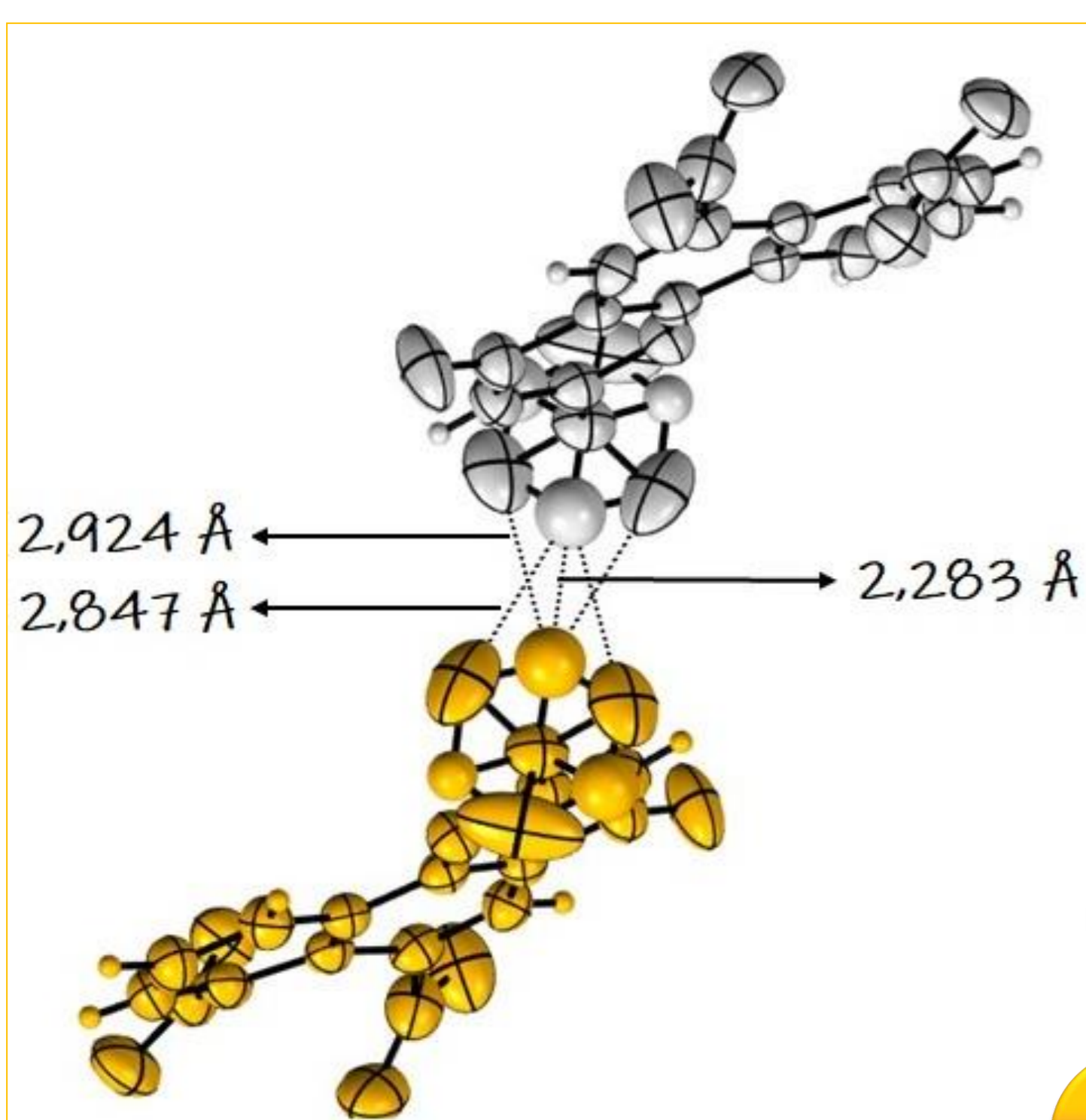
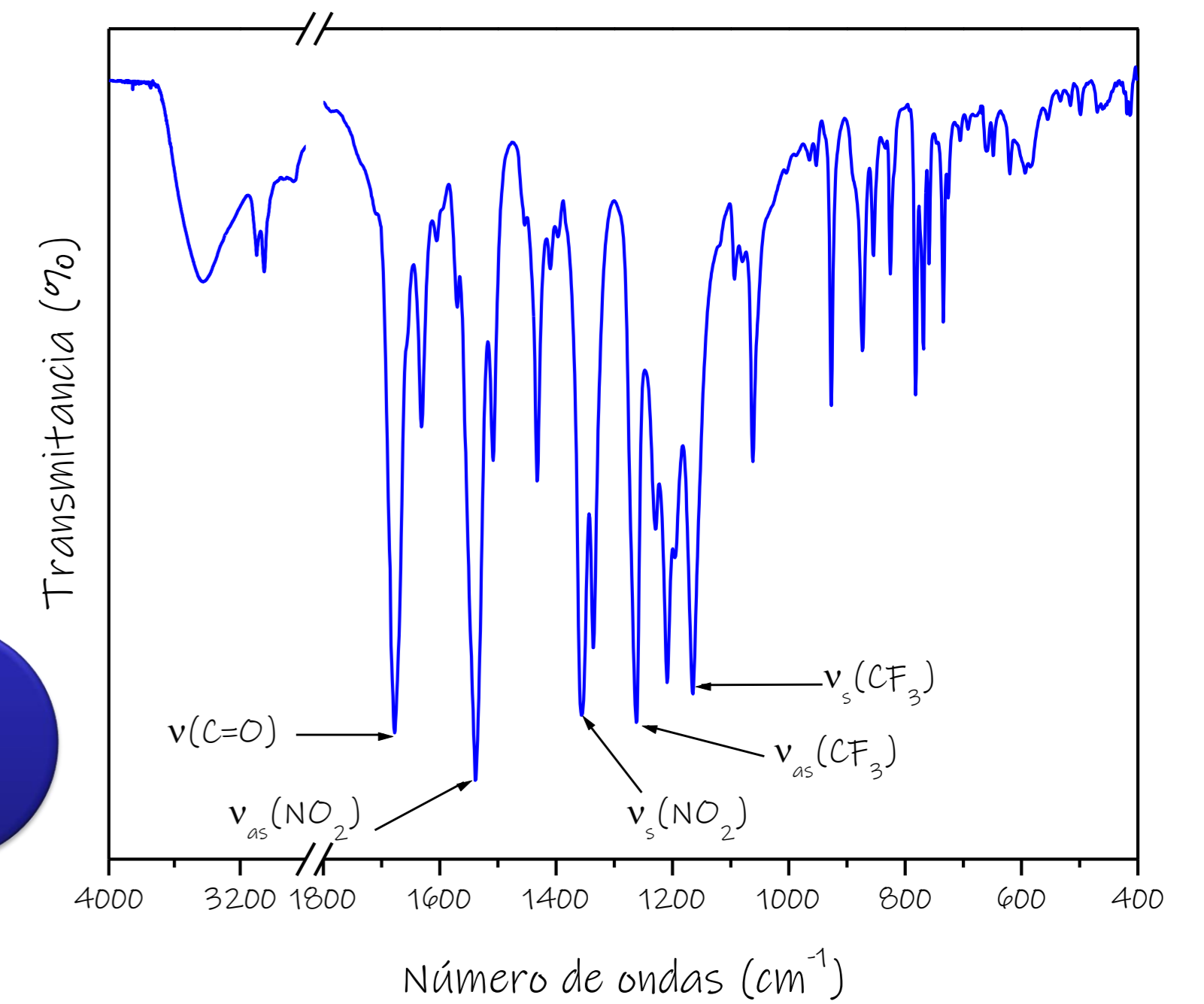
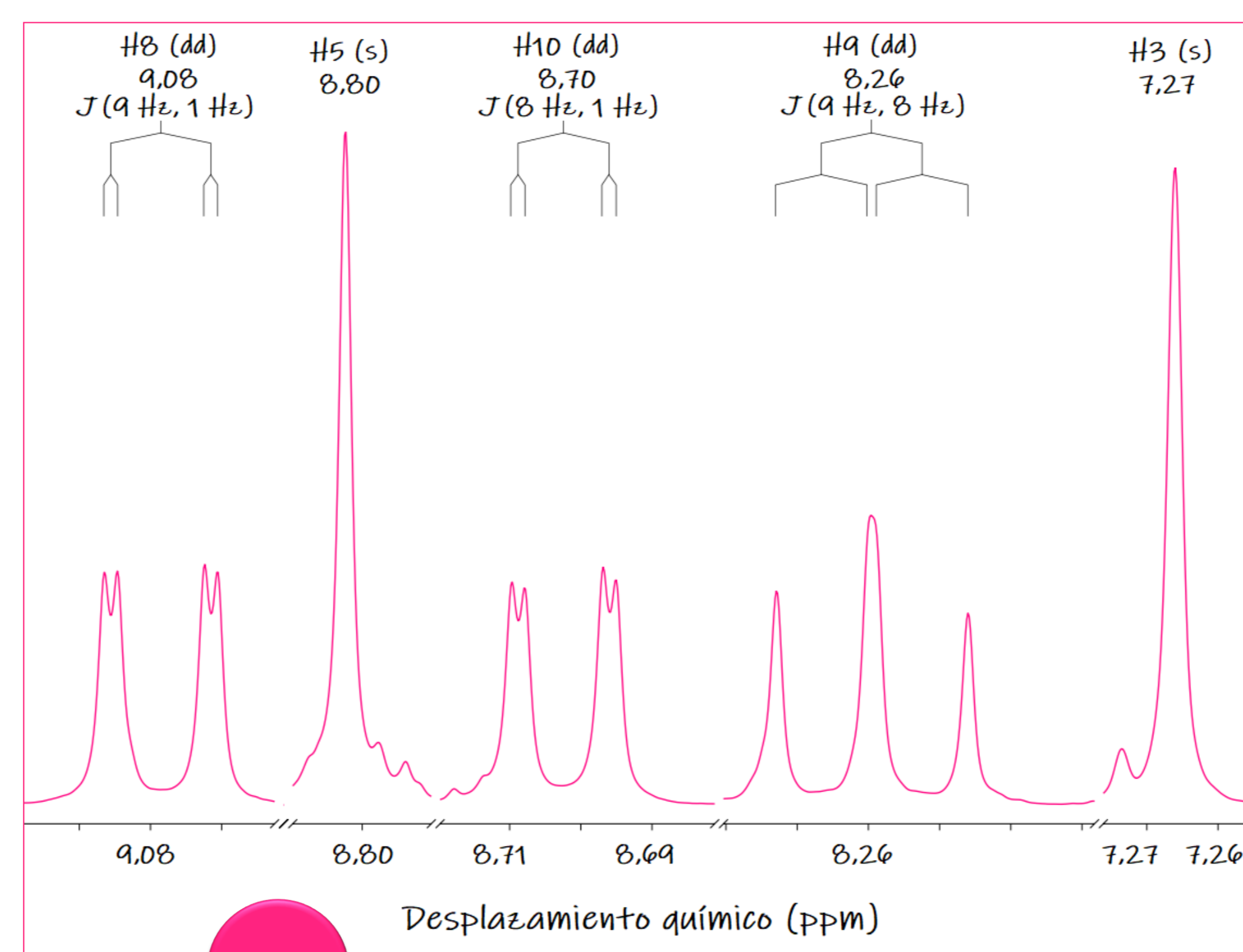
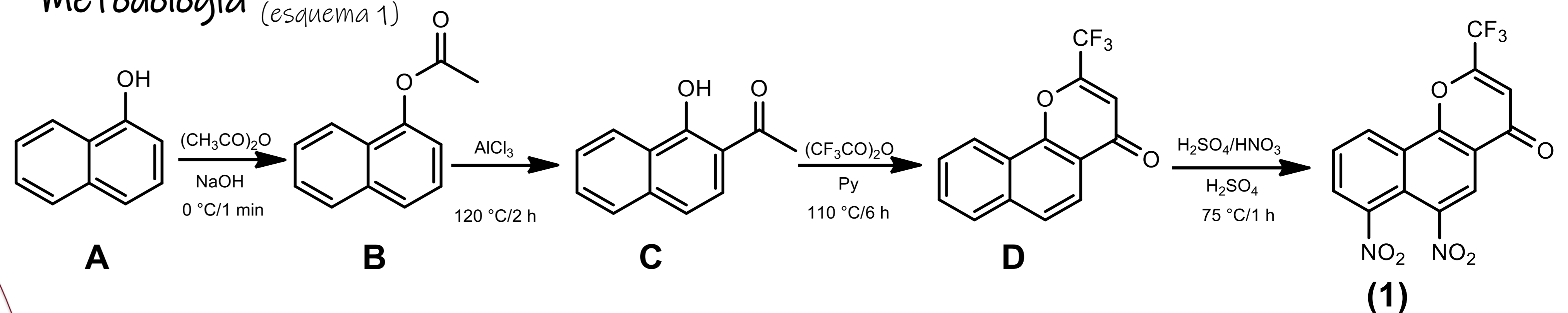
<sup>5</sup>Dpto. de Química, Fac. Cs. Exactas, UNLP, 47 y 115, (1900) La Plata, Argentina.

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

## Introducción

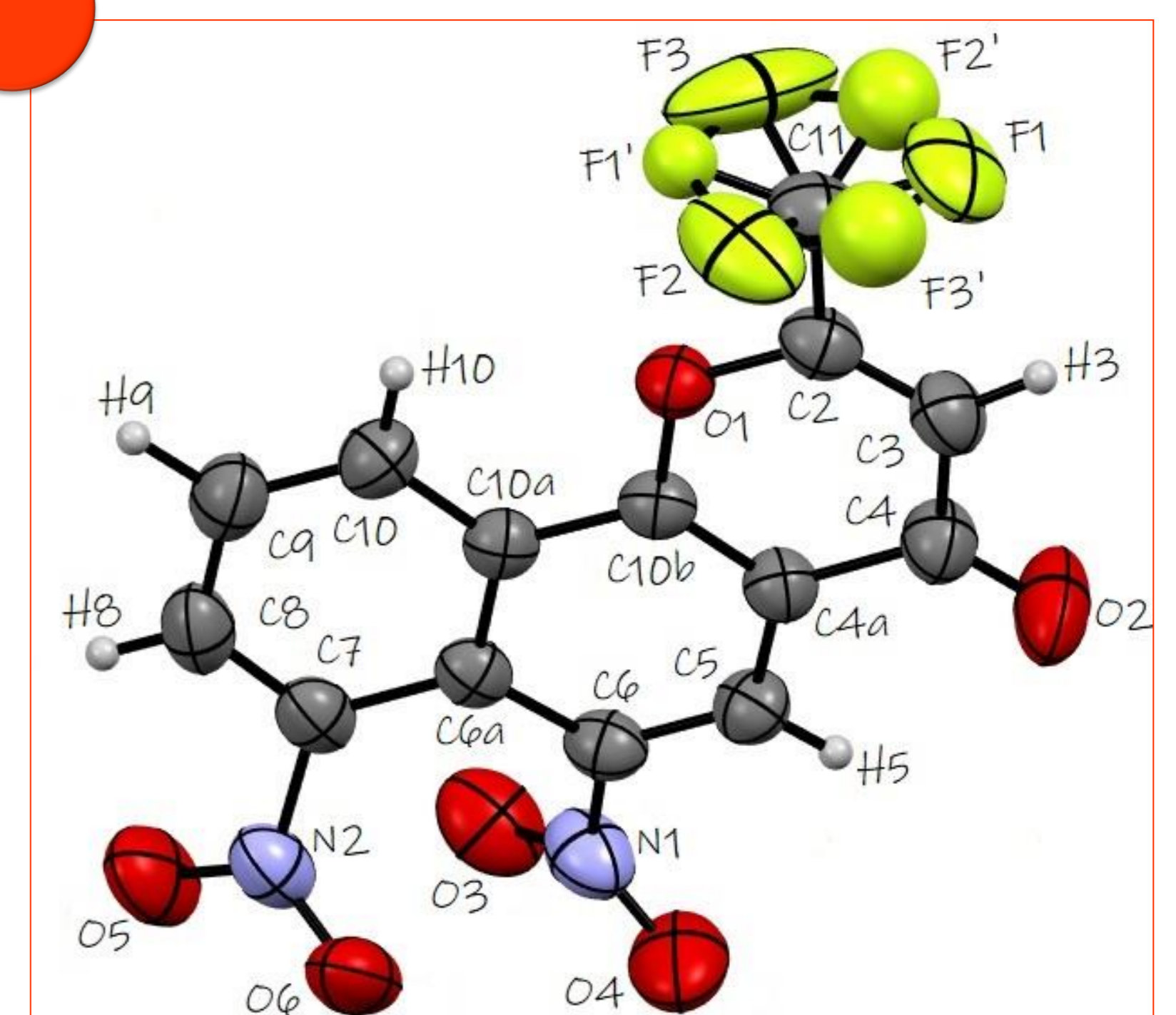
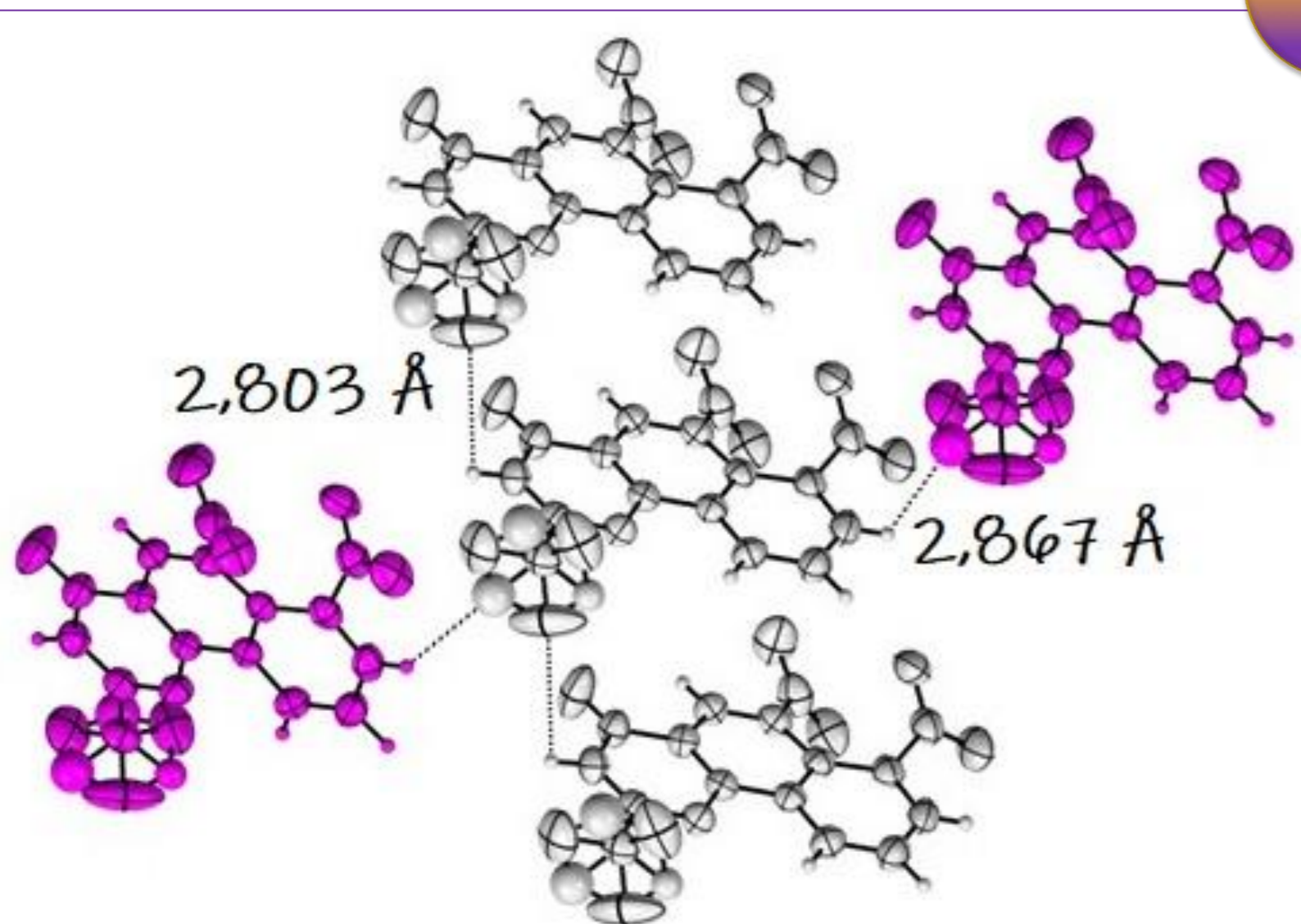
Las cromonas son compuestos de origen natural que también se pueden obtener por vía sintética. Una alternativa rápida y eficiente es la propuesta por Henao Castañeda,<sup>1</sup> que permite sintetizar una variedad de 2-trifluorometilcromonas (2-TFMC) partiendo de diferentes fenoles. Sin embargo, también es posible obtener derivados modificando las 2-TFMC mediante reacciones de sustitución en el anillo aromático.<sup>2</sup> En el esquema 1 se presentan las etapas de síntesis que se llevaron a cabo para obtener la 6,7-dinitro-2-(trifluorometil)- $\alpha$ -naftocromona (1). El compuesto obtenido es nuevo y se caracterizó por IR, RMN y DRX. Los cálculos computacionales contribuyeron a la asignación de los espectros vibracionales.

## Metodología (esquema 1)



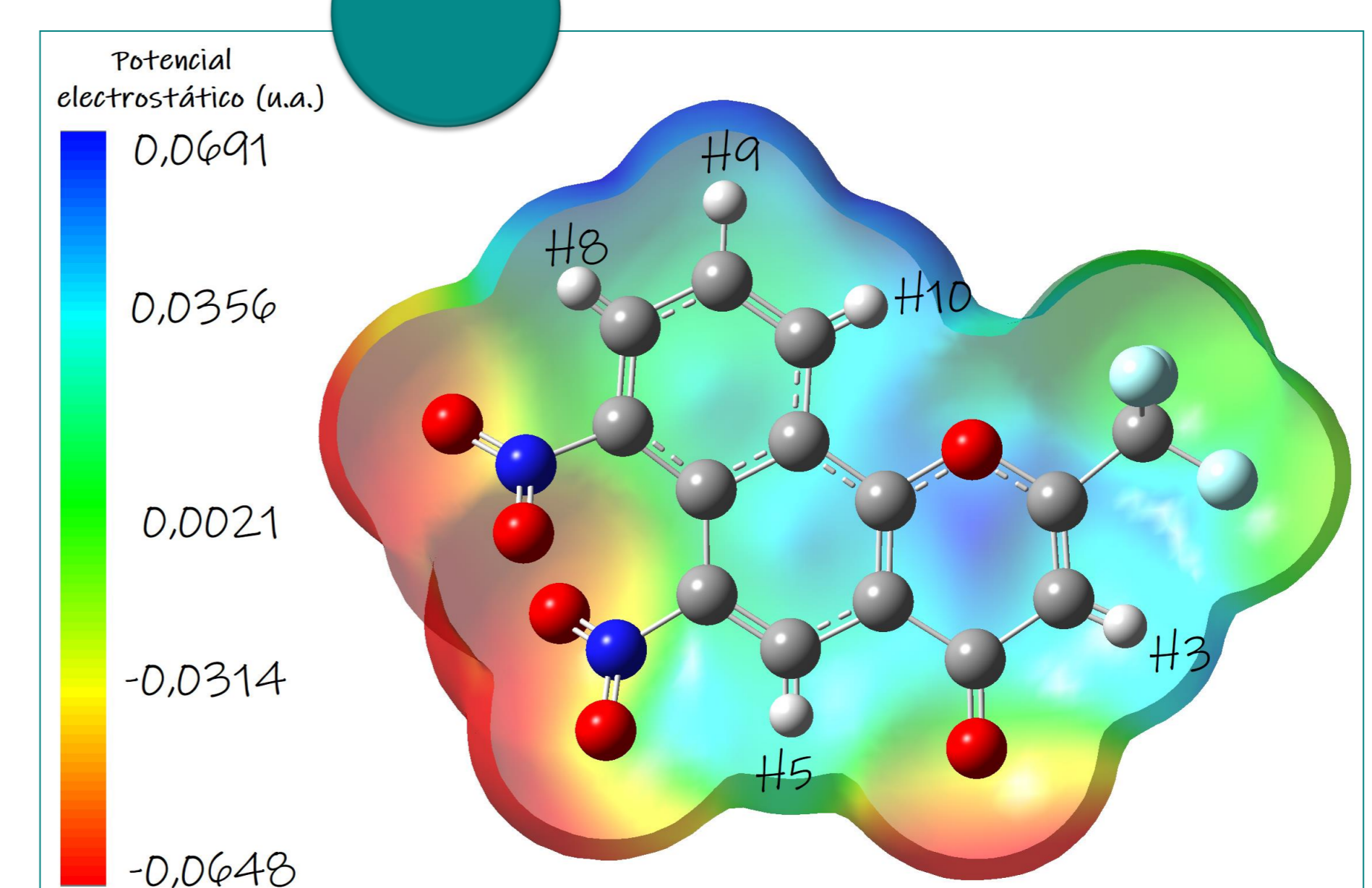
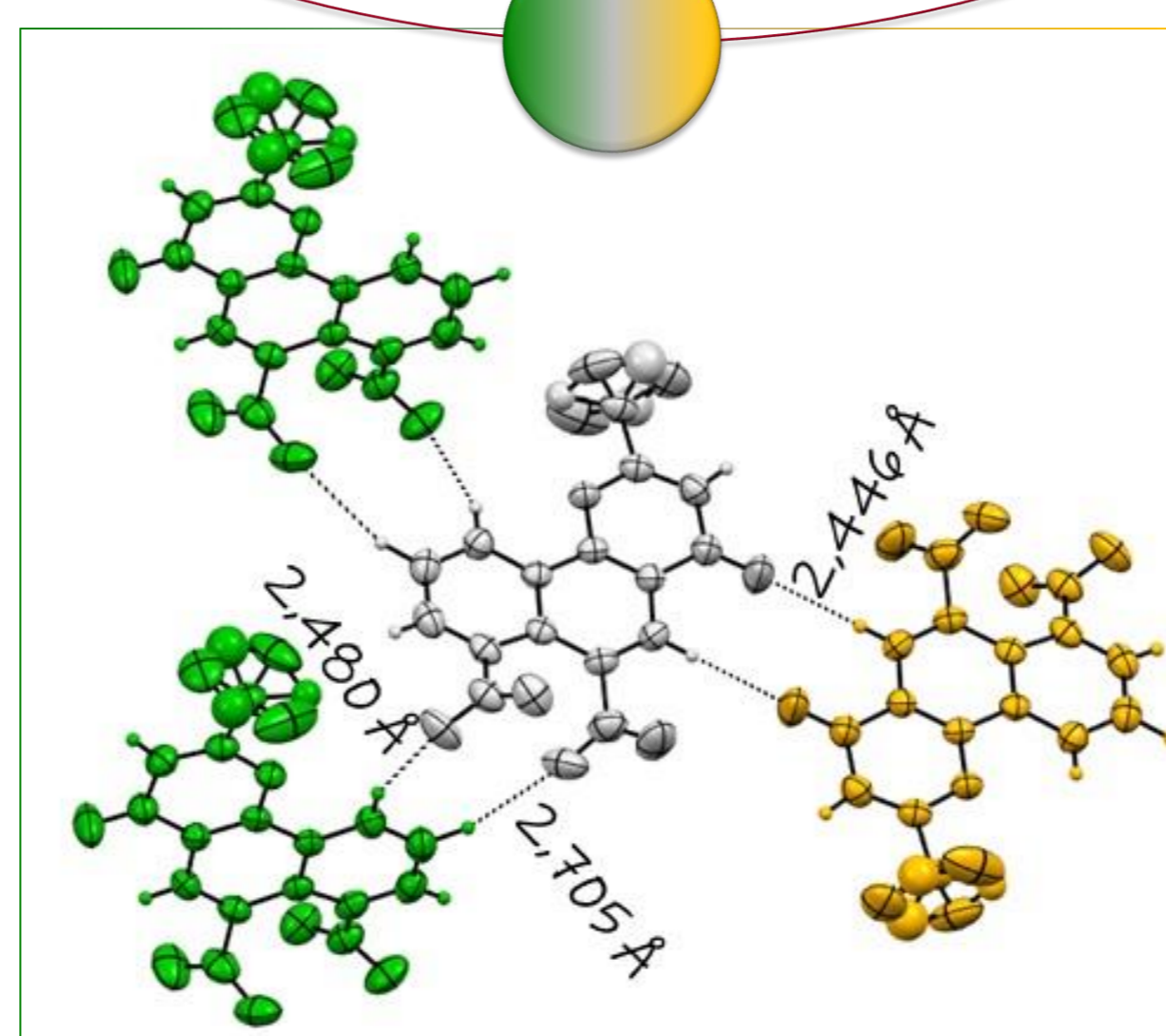
## Resultados

En el espectro de RMN de  $^1\text{H}$  (acetona- $d_6$ ) se observan dos singletes (H3 y H5) y el sistema de spin de 3 núcleos aromáticos acoplados entre sí (H8, H9 y H10). El espectro IR muestra bandas de absorción debidas a los estiramientos  $\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{NO}_2$  y  $\text{CF}_3$ . La geometría molecular calculada guarda buena relación con la experimental. El potencial electrostático molecular (MEP) indica que las zonas núcleo- y electrofílicas se ubican en los oxígenos y los hidrógenos aromáticos, respectivamente. Esta distribución se correlaciona con las interacciones intermoleculares observadas en la estructura elucidada por DRX, en la que se identifican importantes contactos  $\text{NO}\cdots\text{HC}$  y  $\text{CO}\cdots\text{HC}$ . Además, se observa que el grupo  $\text{CF}_3$  presenta su característico desorden térmico debido a su alta simetría,<sup>3</sup> lo que da lugar a importantes interacciones intermoleculares  $\text{F}\cdots\text{F}$  y  $\text{F}\cdots\text{H}$ .



## Conclusiones

Las señales en  $^1\text{H}$  RMN dan cuenta de la doble nitración del anillo de naftaleno. Las moléculas se ordenan en el cristal favoreciendo las interacciones no convencionales, con una importante participación de los contactos  $\text{F}\cdots\text{F}$ .



## Referencias

- 1) Castañeda, I. C. H., Et al. Tetrahedron Lett. UK, 2011, 52, 1436-1440.
- 2) Sosnovskikh, V. Y., Et al. Russ. Chem. Bulletin. Russia, 2000, 49, 2074-2076.
- 3) Müller, P., Crystallogr. Rev. UK, 2009, 15, 57-83

## Agradecimientos

Los autores agradecen a CONICET, Departamento de Ciencias Básicas - UNLu, Facultad de Ciencias Exactas - UNLP.