



## 4-(1'-HIDROXI-4',5'-DINITRONAFTALEN-2'-IL)CARBONIL-5-TRIFLUOROMETIL-2H-1,2,3-TRIAZOL: CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIO DE 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.

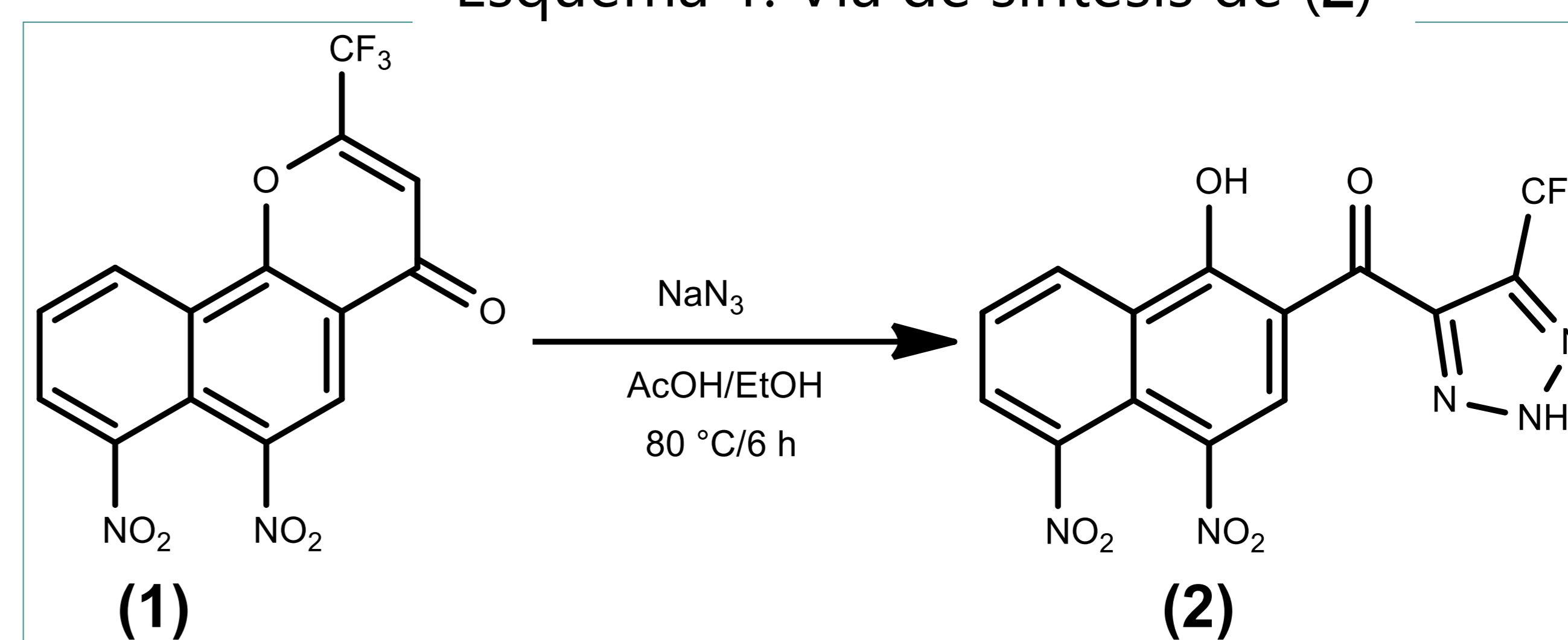
<sup>5</sup>Dpto. de Química, Fac. Cs. Exactas, UNLP, 47 y 115, (1900) La Plata, Argentina.

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

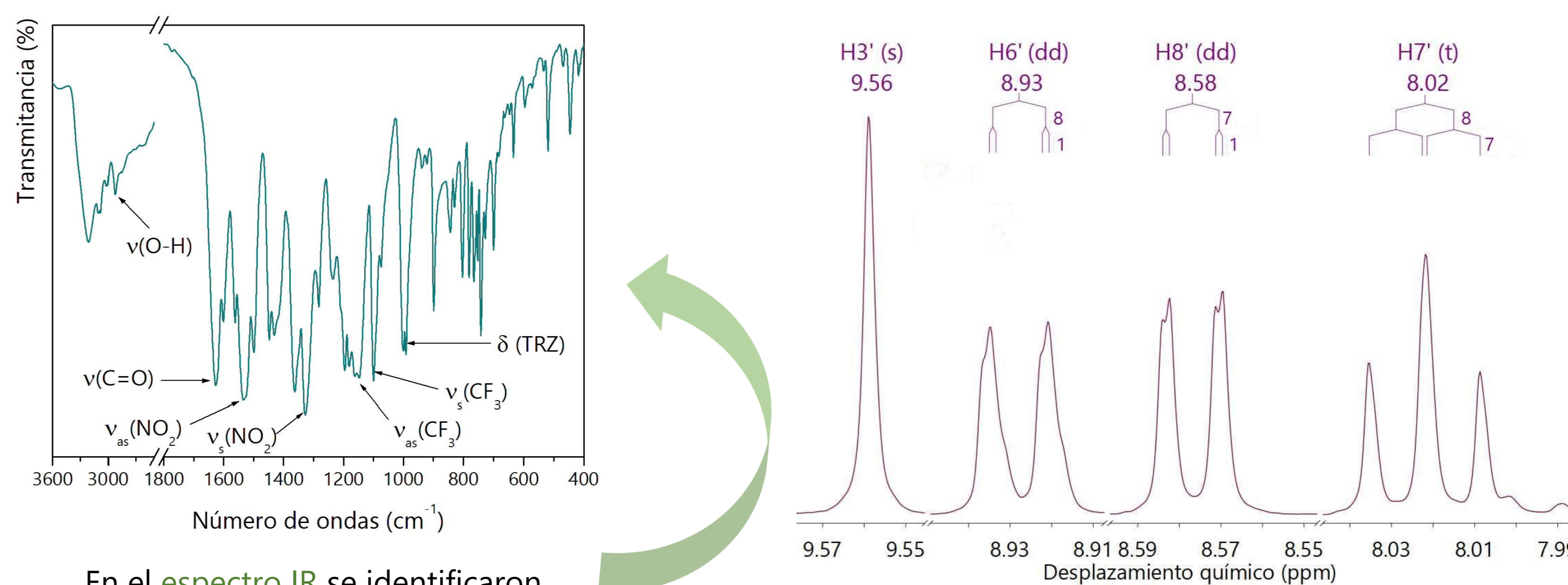
### Introducción

La síntesis de nuevas estructuras moleculares es un vínculo fuerte entre la ciencia y la industria.<sup>1</sup> Dentro de los estudios relevantes, las interacciones moleculares son fundamentales para entender comportamientos ya sea en sistemas químicos o biológicos.<sup>2</sup> En este trabajo se ha sintetizado, a partir de una 2-trifluorometilcromona (1), un nuevo triazol, 4-(1'-hidroxi-4',5'-dinitronaftalen-2'-il)carbonil-5-trifluorometil-2H-1,2,3-triazol (2), esquema 1,<sup>3</sup> el cual ha sido caracterizado por espectroscopia (IR y RMN) y por difracción de rayos X (DRX). Además, se han identificado las principales interacciones moleculares que tienen lugar en el empaquetamiento cristalino. La caracterización ha sido complementada con cálculos computacionales.

### Esquema 1. Vía de síntesis de (2)



### Resultados



En el espectro IR se identificaron, tentativamente, los estiramientos de los grupos O-H, C=O, NO<sub>2</sub> y CF<sub>3</sub> y una deformación asociada al anillo triazol.

Los espectros RMN fueron medidos en acetona-d<sub>6</sub> y las señales tanto en <sup>1</sup>H (espectro, señales aromática) como en <sup>13</sup>C (tabla) son acordes a las esperadas para los diferentes núcleos.

Núcleo	δ (ppm)
C=O	188,4
CF <sub>3</sub>	121,3 - q - <sup>1</sup> J <sub>CF</sub> = 268 Hz
C4	142,9
C5	140,7 - q - <sup>2</sup> J <sub>CF</sub> = 40 Hz
C1'	167,6
C2'	112,1
C3'	128,5
C4'	137,7
C4'a	127,9
C5'	146,6
C6'	130,8
C7'	130,9
C8'	131,2
C8'a	121,3

Una molécula de DMSO cristaliza junto a la estructura en estudio formando una interacción NH...OS.

La estructura cristalina (DRX) señala una fuerte interacción intramolecular tipo puente de hidrógeno que involucra a los grupos O-H y C=O.

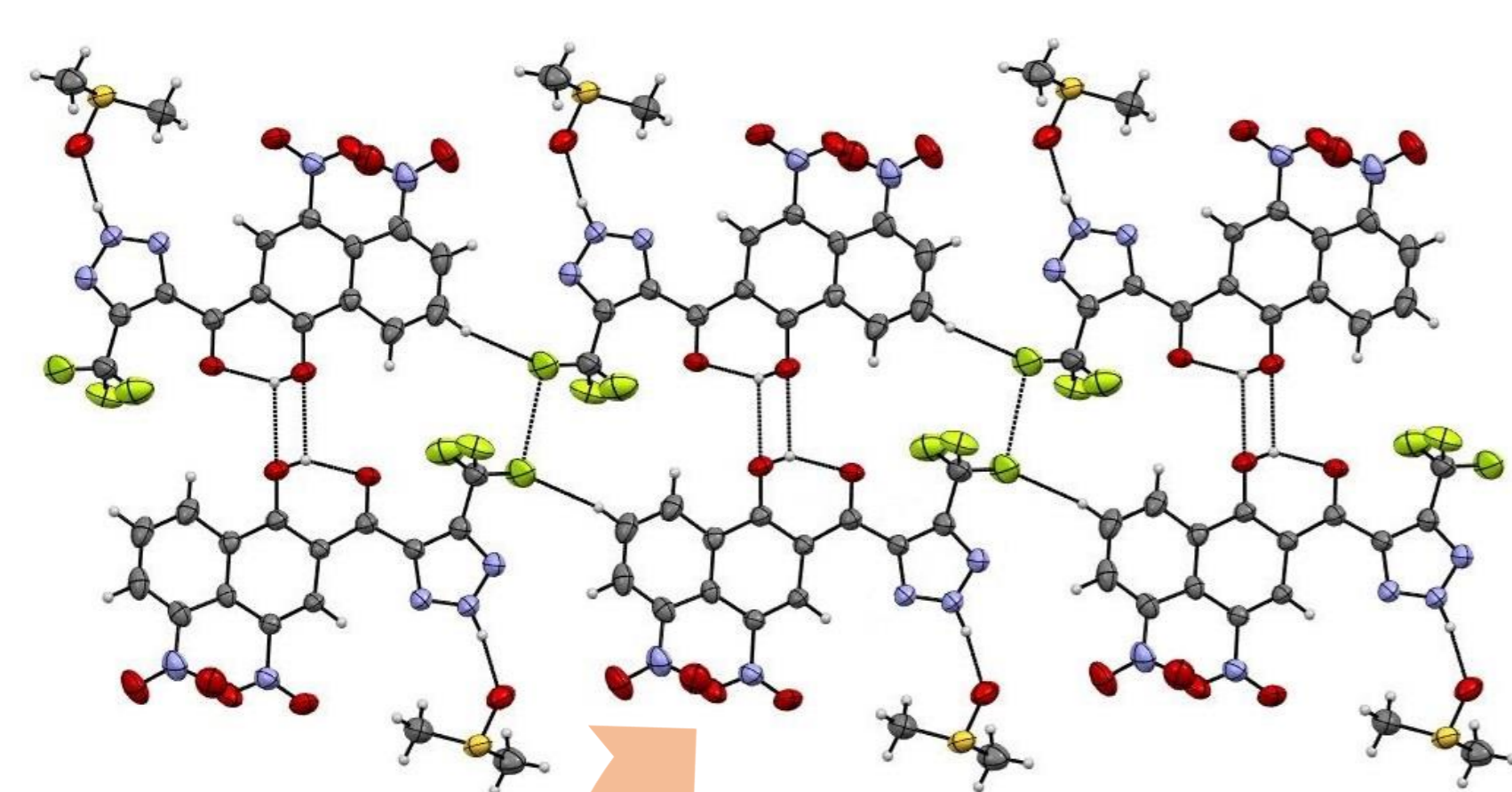


### Referencias

- Ragan, J.A., Dreher, S.D., J. Org. Chem. U.S., 2019, 84, 4577-4579.
- Dietrich, D. R., Chemo-Biological Interactions. Germany. 2021, 335, 1-99.
- Sosnovskikh, V. Ya., Usachev, B., Mendeleev Commun., Netherlands., 2002, 12, 75-76.

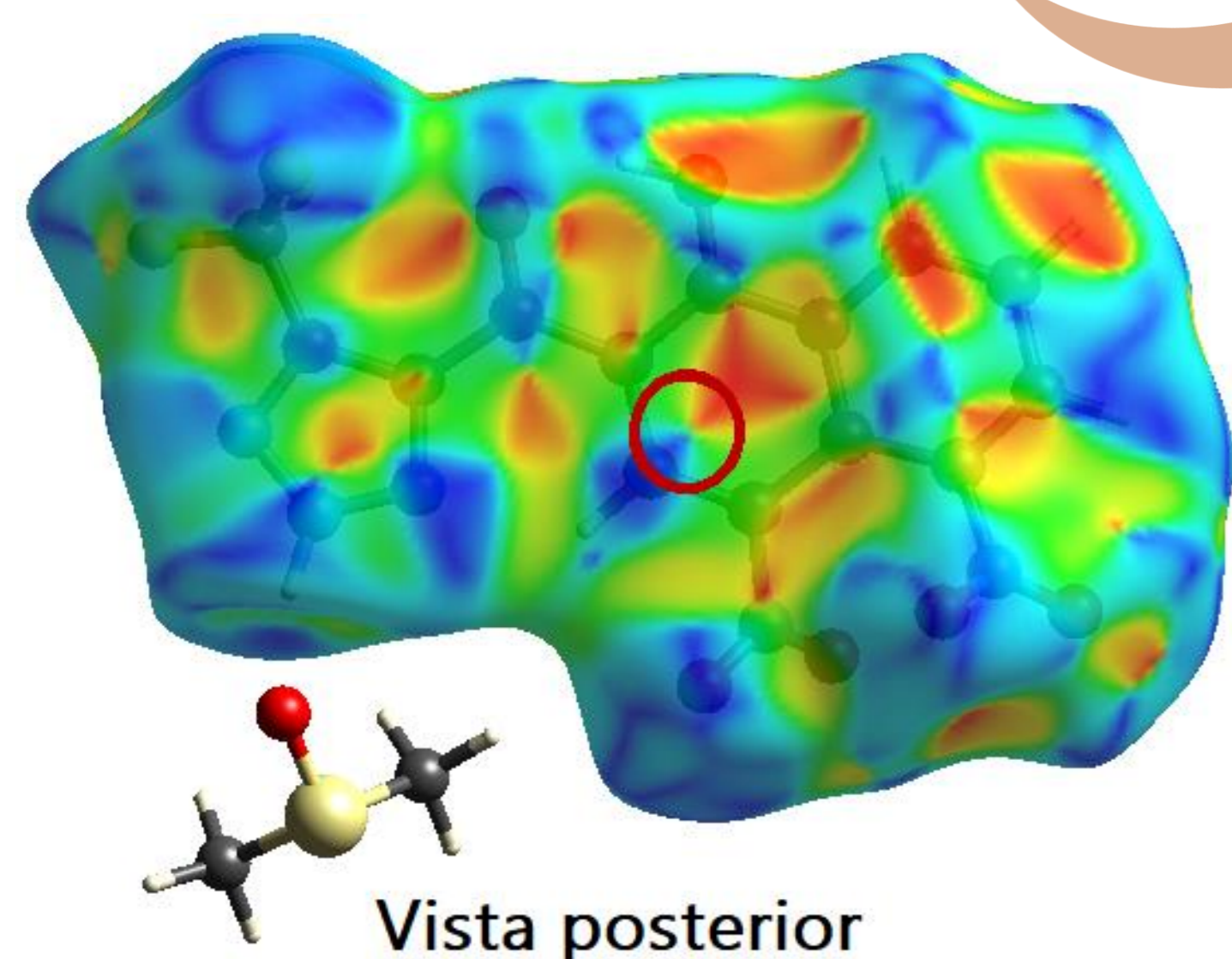
### Agradecimientos

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



Las moléculas se mantienen unidas por contactos asociados, principalmente, a interacciones intermoleculares OH...OC, CH...F y F...F.

La superficie de Hirshfeld, evaluada con el descriptor Shape Index, indica además la existencia de interacciones π...π.



Vista posterior

### Conclusiones

Vista frontal

La interacción intramolecular le confiere planaridad a la molécula. Los contactos intermoleculares, incluido el NH...OS (DMSO), permiten que las moléculas se ordenen formando láminas unidas por interacciones tipo π-stacking.