

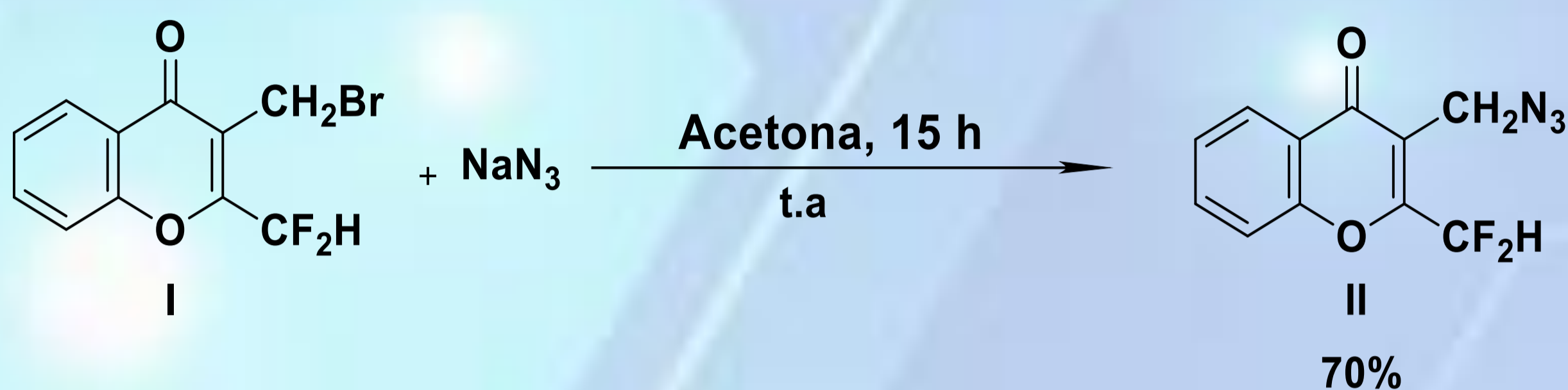
Narváez Ena,¹ Alcívar Christian,² Bonilla Pablo,² Ulic Sonia,^{1,3} Jios Jorge,⁴ Heredia-Moya Jorge,⁵ Piro Oscar,⁶ Echeverría Gustavo,⁶ Ramos Luis⁷

¹CEQUINOR-CONICET. Dpto. de Química, Fac. Cs. Exactas, UNLP, Bv. 120 N° 1465 (1900) La Plata, Argentina. ²Fac. Cs. Químicas, Universidad Central del Ecuador, Ecuador. ³Departamento de Cs. Básicas, Universidad Nacional de Luján, Rutas 5 y 7, (6700) Luján, Buenos Aires, República Argentina. ⁴Laboratorio UPL (UNLP-CIC), Cno. Centenario e/505 y 508, (1897) Gonnet, Argentina. ⁵Centro de Investigación Biomédica, Facultad de Ciencias de la Salud Eugenio Espejo, Universidad UTE, Quito, Ecuador. ⁶IFLP-CONICET. Dpto. de Física, Fac. de Cs. Exactas, UNLP, CC. 67 (1900) La Plata, Argentina. ⁷Centro de Investigación de Alimentos CIAL, Universidad UTE, Ecuador.

Introducción

Las cromonas son un grupo de compuestos de gran interés debido a sus propiedades biológicas,¹ lo cual ha llevado a realizar estudios exhaustivos tanto experimentales como teóricos para determinar su comportamiento estructural en estado sólido. En este trabajo se profundiza el análisis de interacciones intra e intermoleculares, utilizando herramientas computacionales como Crystalexplorer17.5 que permitieron el estudio de la superficie de Hirshfeld,² de una nueva cromona: 3-azidometil-2-difluorometilcromona.

Metodología



En un balón de 50 mL se disolvieron 78,4 mg (0,2712 mol) de I con 52,7 mg (0,8106 mol) de azida de sodio en 10 mL de acetona anhidra. La reacción se realizó a temperatura ambiente con agitación constante durante 15 horas. La evolución de la misma fue monitoreada por cromatografía en capa fina (Hexano:Acetato de Etilo; 9:1). El producto se filtró, lavó con acetona fría, el solvente se rota-evaporó y el producto se purificó por cromatografía en columna (Hexano:Acetato de etilo; 9:1). Rendimiento de II: 70%. P.f.: (97,5-99,4 °C). El compuesto fue caracterizado mediante espectroscopia infrarroja y Raman, difracción de rayos X y mediante cálculos químico cuánticos.

Resultados

Caracterización espectroscópica

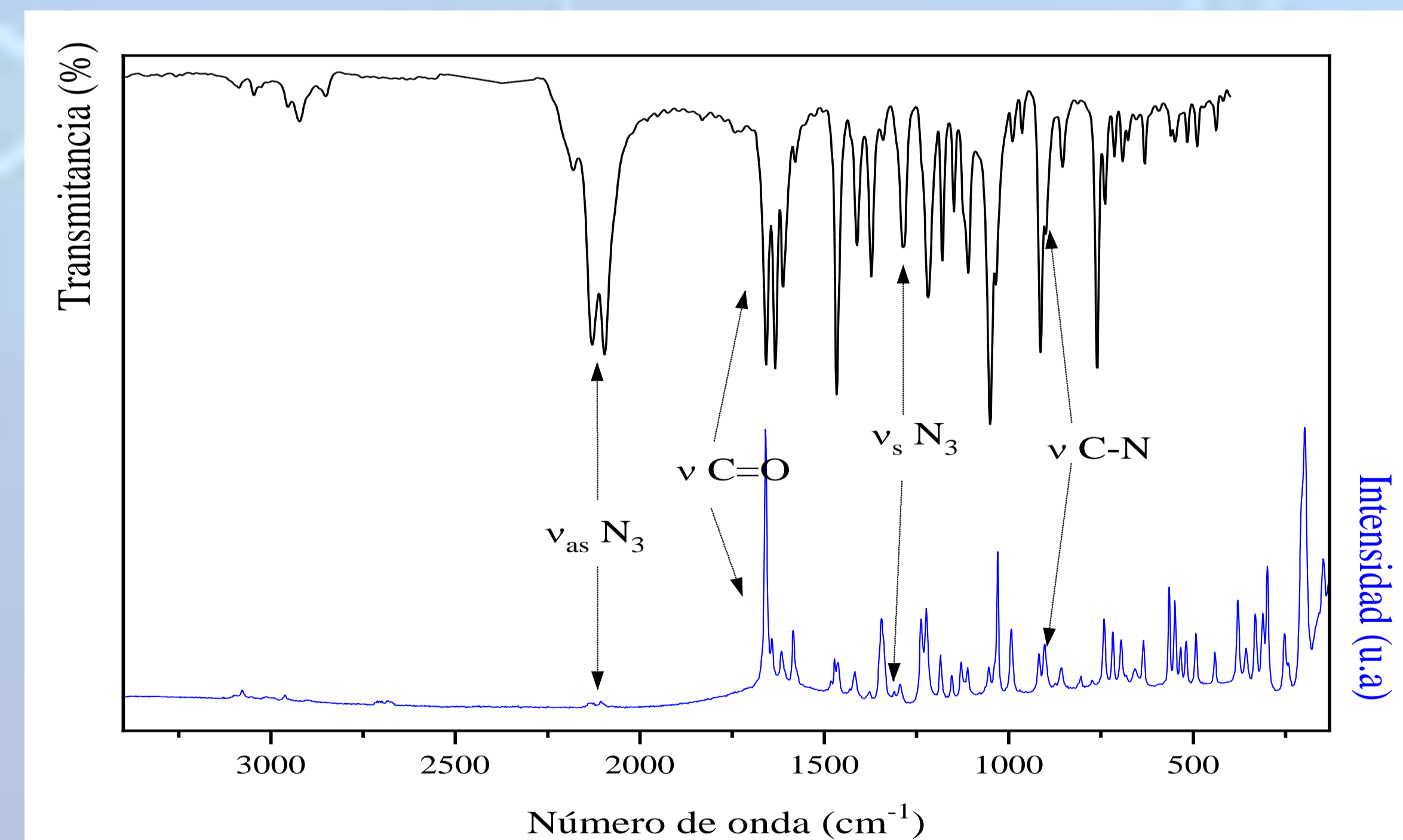


Figura 1.- Espectro experimental infrarrojo (trazo superior) y Raman (trazo inferior) de 3-azidometil-2-difluorometilcromona

Tabla 1. Asignación de algunos modos normales de vibración

Modo	IR exp.	Raman exp.	Freq. Calc.	Asignación
ν_1	2094 (mf)	2105 (5)	2237 (587)	$\nu_{as} N=N=N$
ν_2	1657 (mf)	1659 (100)	1702 (267)	$\nu C=O$
ν_3	1285 (d)	1311 (4)	1328 (114)	$\nu_s N=N=N$
ν_4	900 (d)	902 (13)	896 (21)	$\nu N-C$

Los espectros IR y Raman experimentales se presentan en la Figura 1. Las bandas correspondientes a los estiramientos antisimétrico y simétrico del grupo N_3 (Tabla 1) se observaron en 2094 y 1285 cm^{-1} , respectivamente. La absorción intensa en 1657 cm^{-1} se atribuyó al estiramiento del grupo $C=O$ y la banda localizada en 900 cm^{-1} al estiramiento $C3'-N1$. La asignación se llevó a cabo por comparación con moléculas relacionadas y con resultados provenientes de los cálculos teóricos, encontrándose una buena correlación entre los datos observados y calculados.

Agradecimientos

A la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Central del Ecuador, al Instituto CENBIO y CIAL de la Universidad UTE, al CONICET, a la Universidad Nacional de la Plata (UNLP) y Universidad Nacional de Luján (UNLu) por el apoyo financiero.

Caracterización por difracción de rayos X

