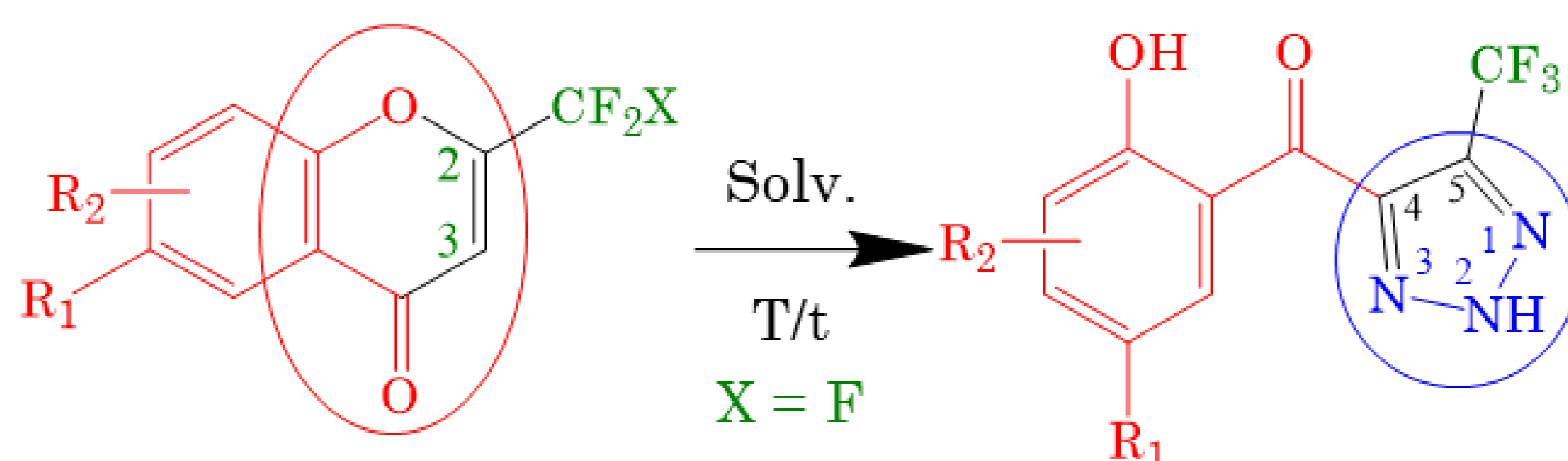


Introducción

Los triazoles y las cromonas son dos familias importantes de heterociclos ya que muchas de las estructuras moleculares en las que se encuentran son especies con relevante bioactividad. Por ejemplo, el fluconazol (triazol) y el ácido cromoglicóico (cromona) son dos fármacos comercializados como antimicótico y antihistamínico, respectivamente. Debido a que son moléculas biológicamente activas, se considera importante estudiar nuevos derivados basados en sus estructuras.



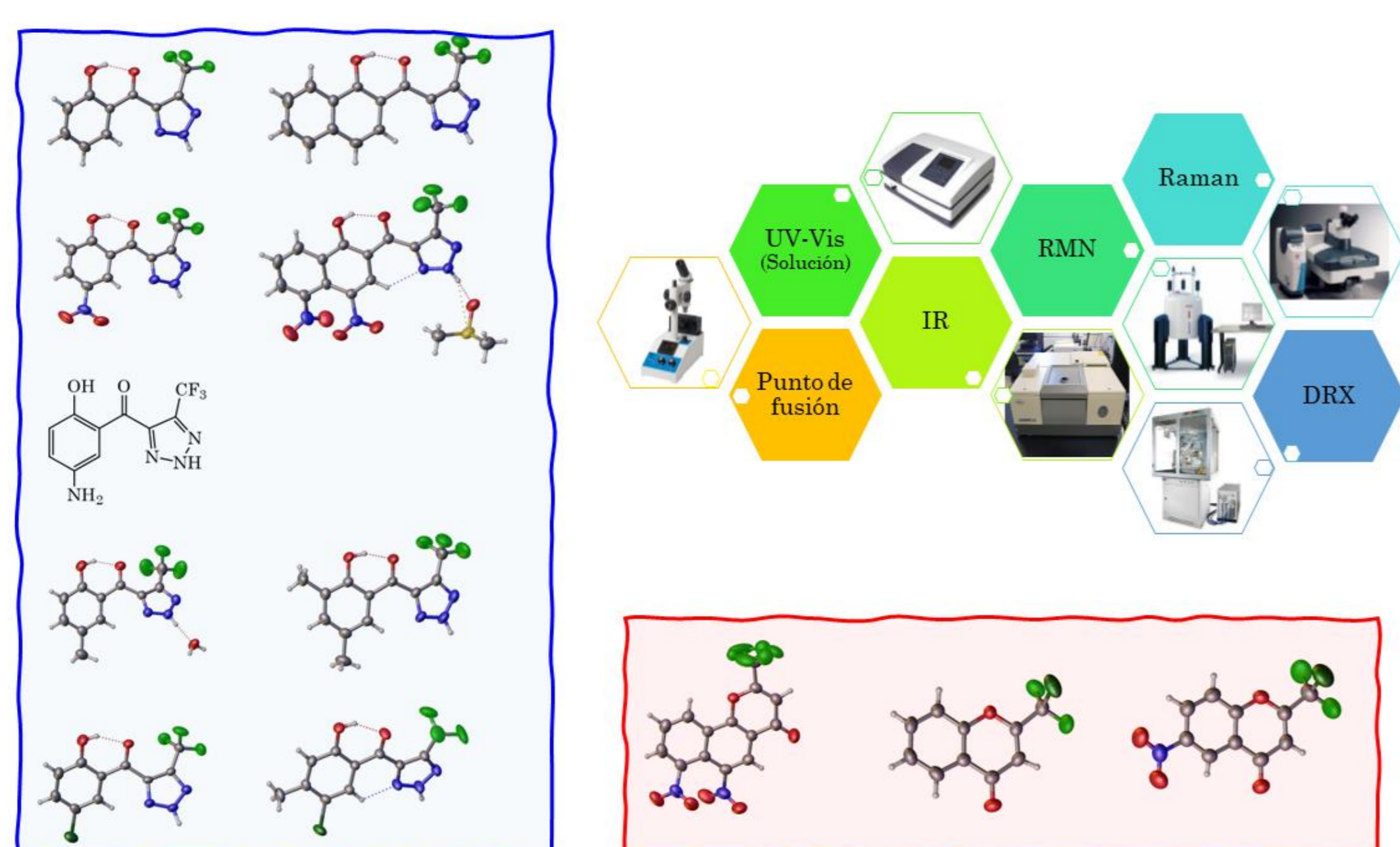
Esquema 1. Obtención de 1,2,3-triazoles-4,5-disustituídos a partir de 2-trifluorometilcromonas.

Metodología

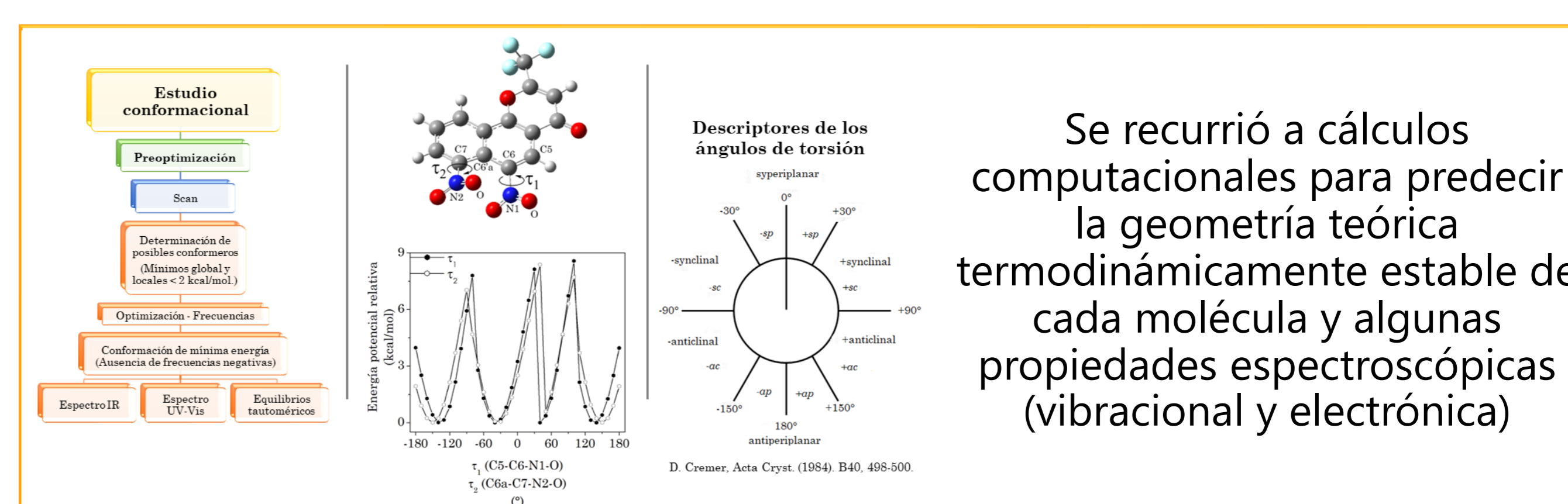
Este trabajo estuvo centrado, principalmente, en la síntesis de 1,2,3-triazoles(vecinales)-4,5-disustituídos, empleando como reactivos de partida 2-trifluorometilcromonas y azida de sodio.[1,2] Las condiciones de reacción dependen de la naturaleza del(los) sustituyente(s) R1(R2) (ver esquema 1). Las cromonas fueron preparadas a partir de *o*-hidroxiacetofenonas, anhídridos clorodifluoro o trifluoroacético y piridina.[3-5]

Resultados y Discusión

Se sintetizaron 9 triazoles y 3 cromonas, los cuales fueron caracterizados por diferentes técnicas espectroscópicas (IR, Raman, UV-Vis y RMN).

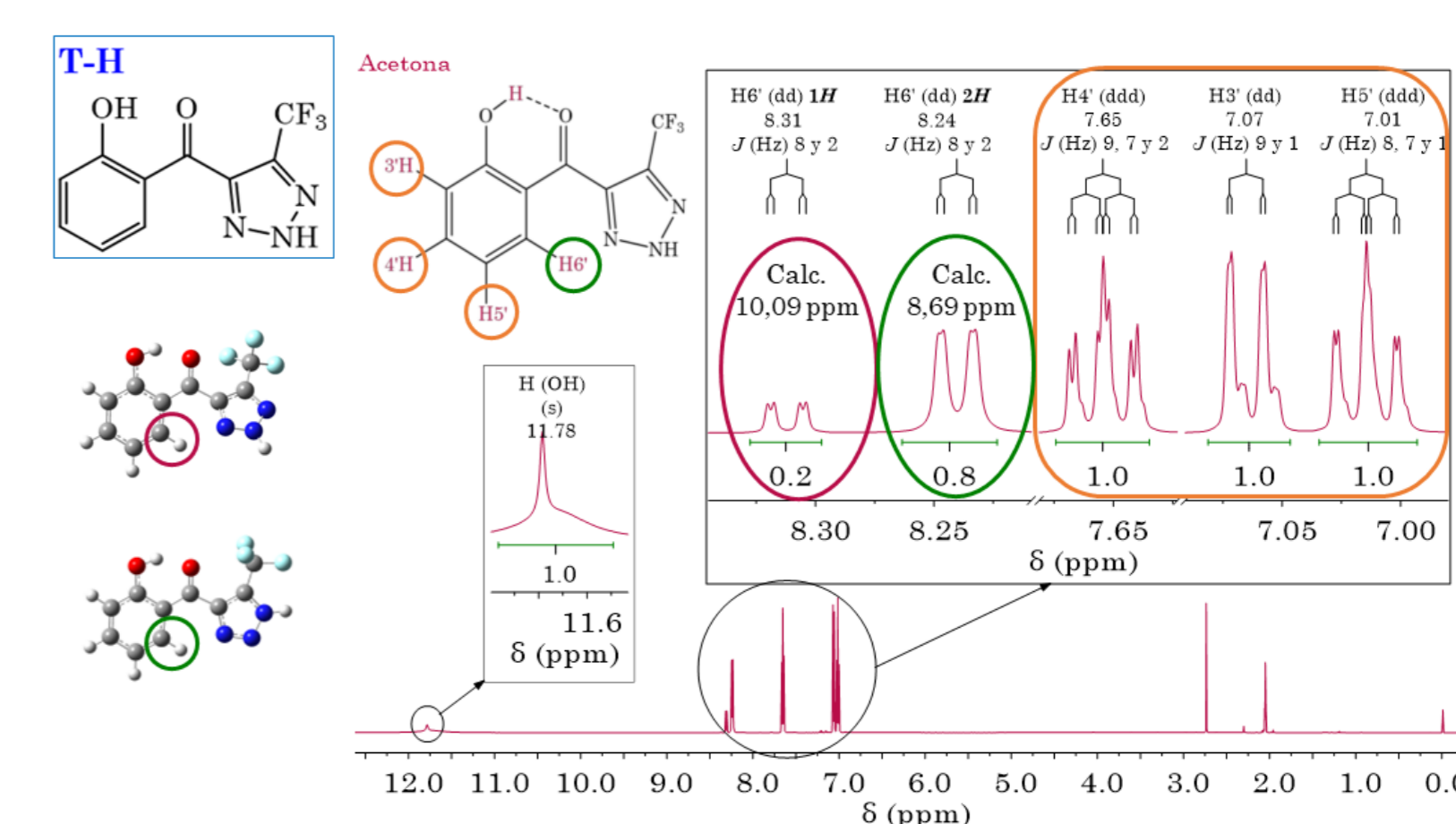


También se resolvió la estructura cristalina de 11 de los compuestos por DRX de monocristal.

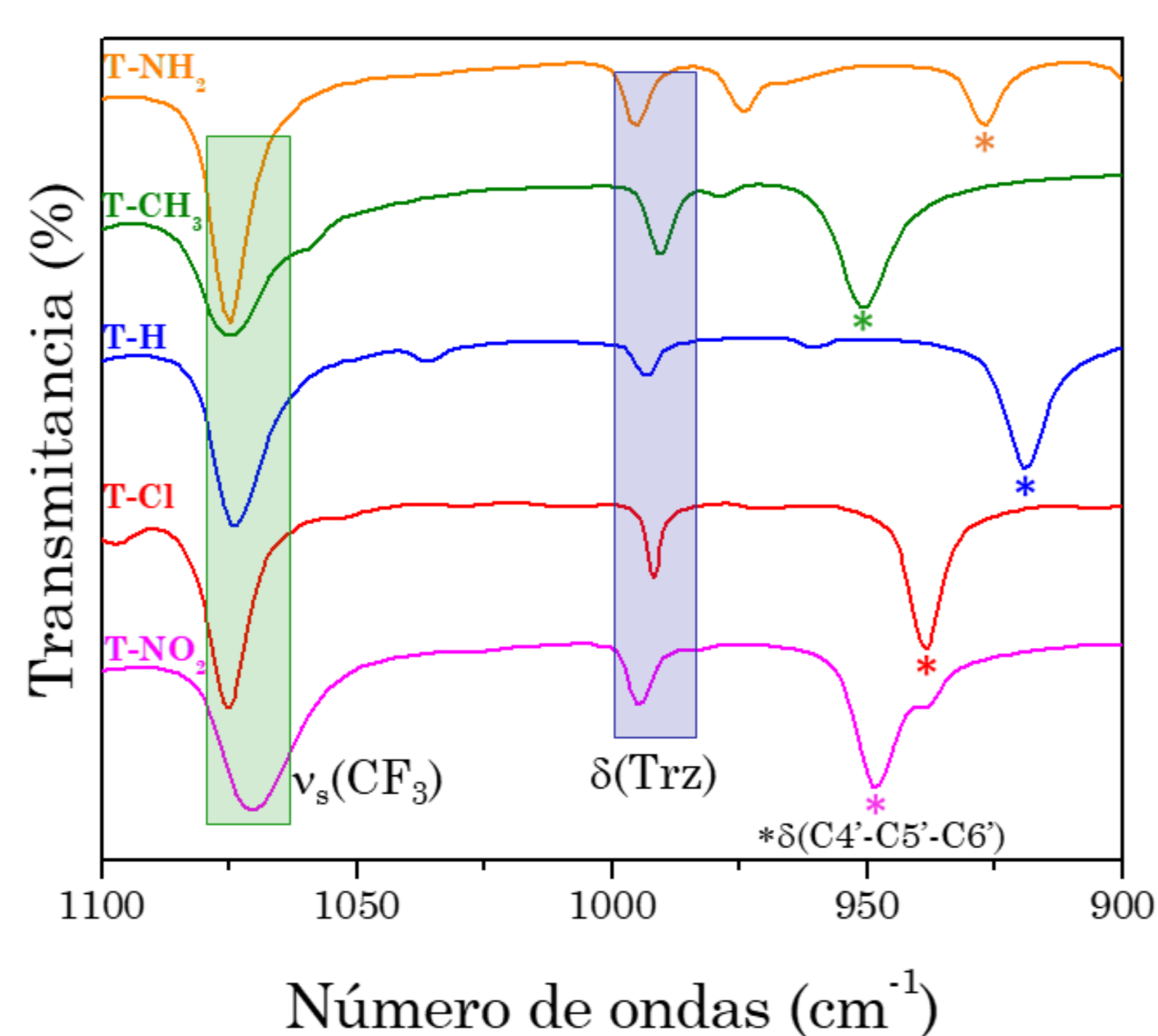


Se recurrió a cálculos computacionales para predecir la geometría teórica termodinámicamente estable de cada molécula y algunas propiedades espectroscópicas (vibracional y electrónica)

También se estudió el equilibrio tautomérico en los triazoles y se determinó que la especie mayoritaria en solución (RMN y cálculos teóricos), estado sólido (DRX) y gaseoso (cálculos teóricos) es la **2H**.

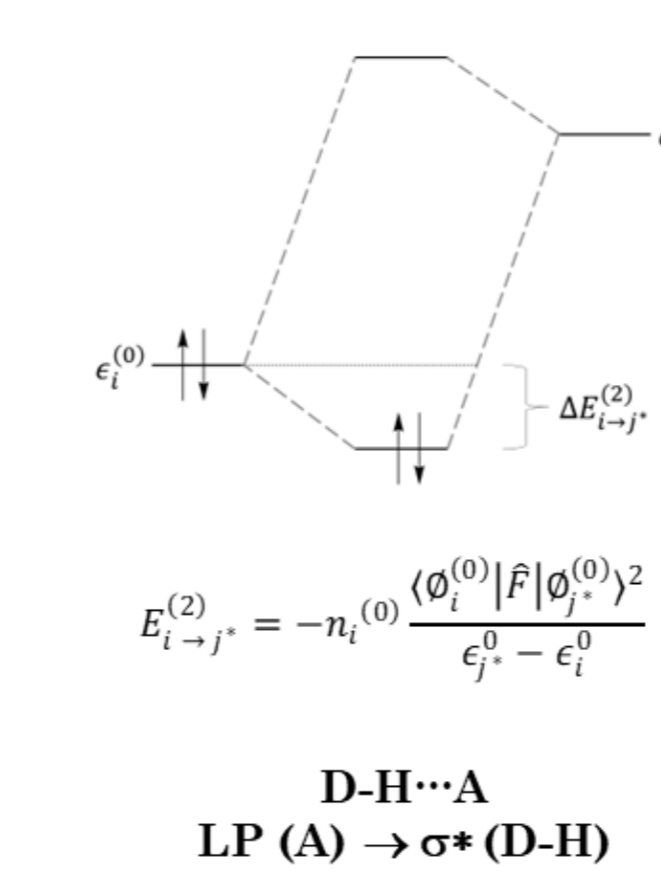


Se determinó un patrón de bandas IR característico (ν_{CF_3} , δ anillo benceno, δ anillo triazol) entre 1100 y 900 cm^{-1} .

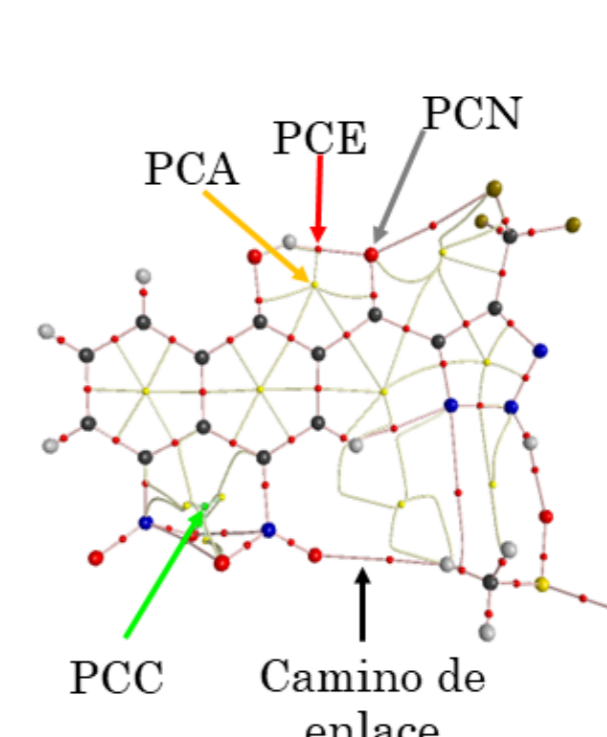


La energía de las interacciones más destacadas se estimó usando herramientas teóricas basadas en el análisis de los Orbitales Naturales de Enlace (NBO) y la topología de la densidad electrónica establecida en la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas (QTAIM).

Análisis de Orbitales Naturales de Enlace (NBO)



Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas (QTAIM)



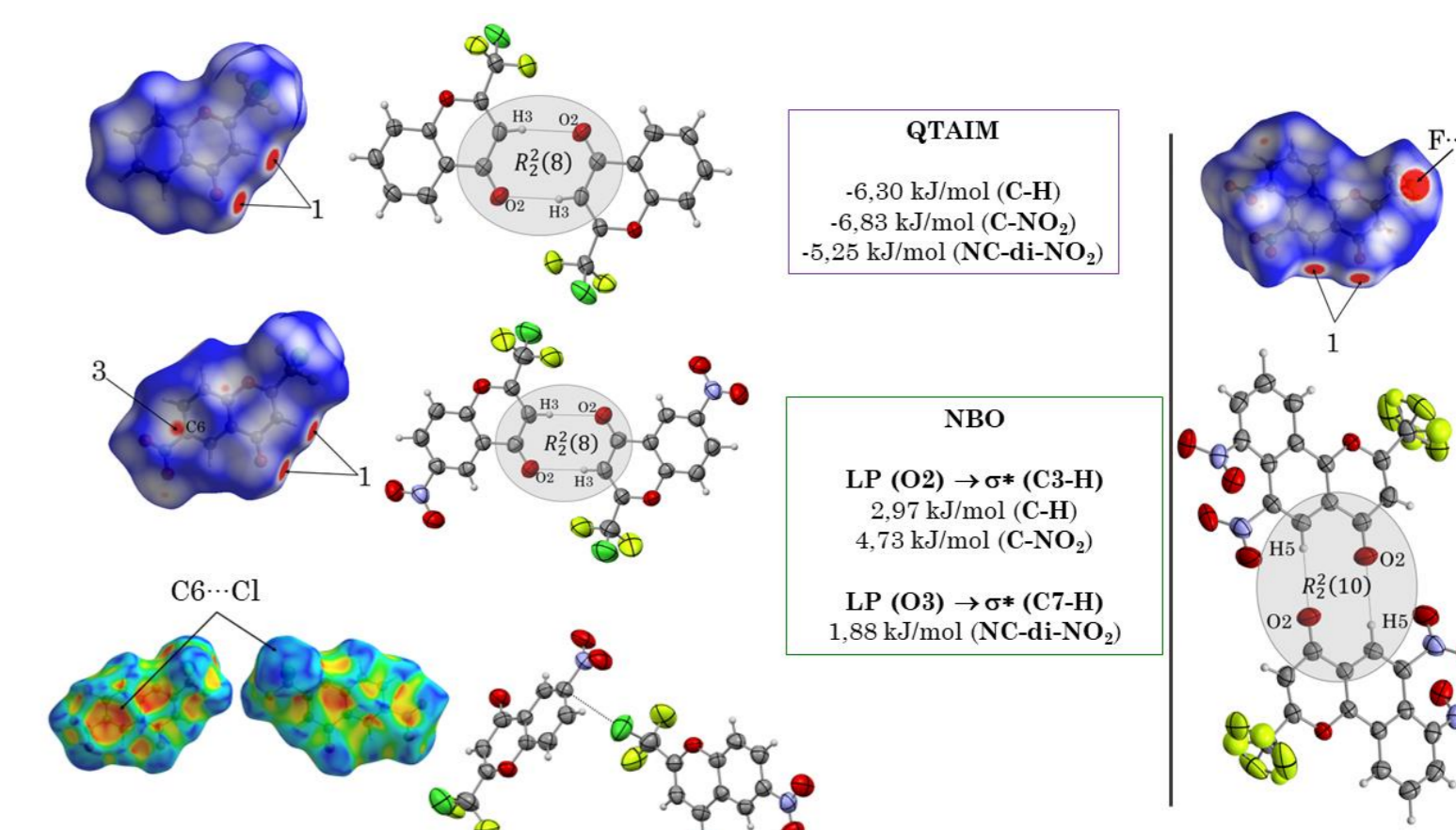
Parámetros topológicos

- Interacciones de capa cerrada (no covalentes)
- $\rho(\mathbf{r}_c) > 0,002$ u.a.
- $\nabla^2 \rho(\mathbf{r}_c) > 0$

Naturaleza de la interacción

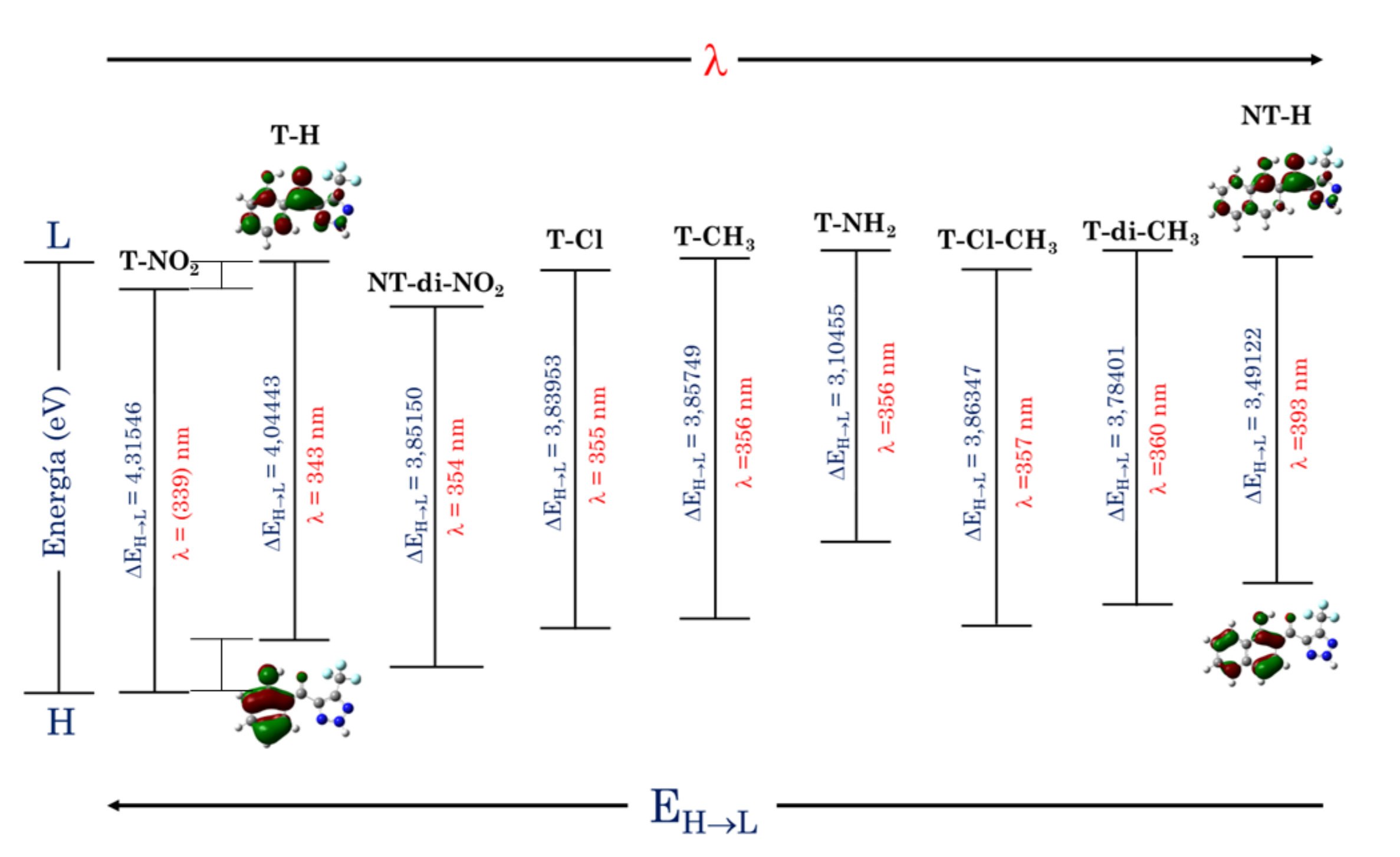
- Interacciones intermoleculares
- $H(r_c)$
- < 0 Parcialmente covalente
- > 0 Electroestáticas o dispersivas
- Energía Interacción (E_{int})

En cuanto a las cromonas, la interacción intermolecular más significativa es la C3-H3...O=C, que origina un sintón molecular de gran importancia desde el punto de vista cristalográfico.



La interacción intermolecular más importante en los triazoles resultó ser la establecida entre el N-H y el oxígeno carbonílico (o con el oxígeno más básico que esté disponible).

Mediante espectroscopia UV-Vis se asignaron las transiciones HOMO→LUMO asociadas a los mismos orbitales moleculares



Referencias

- [1] Sosnovskikh, V.; Usachev, B. I. *Russ. Chem. Bull.*, 2000, 49, 2074.
- [2] Usachev, S. A. *Et al. Tetrahedron.*, 2014, 70, 8863.
- [3] Castañeda, I. C. H. *Et al. Tetrahedron Lett.*, 2011, 52, 1436.
- [4] Avendaño Jiménez, L. P. *Et al. J. Phys. Chem. A.*, 2013, 117, 2169.
- [5] Alcívar León, C.D. *Et al. Chem. Phys.*, 2016, 472, 142.

Agradecimientos

Los autores agradecen a CONICET, CEQUINOR y Facultad de Ciencias Exactas – UNLP.