XXIII CAFQI

aaiFQ
ASOCIACIÓN ARGENTINA DE INVESTIGACIONES FISICOQUÍMICAS

XXIII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA

EL CALAFATE 2023

SÍNTESIS Y ESTUDIO DE UNA NUEVA TRIFLUOROMETIL CROMONA CARBAMOTIOILTIO [>NC(S)S-] SUSTITUIDA

Narváez Ena G.[1], Ulic Sonia E.[1,2], Jios Jorge L.[3], Piro Oscar E.[4], Echeverría Gustavo A.[4]

[1]CEQUINOR (CONICET, CIC, UNLP), Bvd. 120 N°1465, (1900) La Plata, Argentina; [2]Departamento de Cs. Básicas, UNLu, Rutas 5 y 7, Luján, Argentina; [3]Laboratorio UPL (UNLP-CIC), Cno. Centenario e/505 y 508, Gonnet y Dpto. de Química, Fac. de Cs. Exactas, UNLP, 47 esq. 115, La Plata, Argentina; [4]Dpto de Física, Fac. de Cs. Exactas, UNLP e IFLP (CONICET), C.C. 67, La Plata, Argentina.
gabrielanarvaez@quimica.unlp.edu.ar

Introducción: Se describe un nuevo compuesto, (6-cloro-2-trifluorometil-4-oxo-4*H*-cromen-7-il)metil dietilditiocarbamato, que está constituido por un anillo de 2-trifluorometilcromona sustituido y un grupo ditiocarbamato (>NC(S)S-) los cuales son de gran interés por su amplia variedad de propiedades biológicas,[1–3]. Además, el grupo ditiocarbamato ha sido reportado como un buen ligante de metales en la purificación de aguas contaminadas. Por otro lado, para la síntesis de compuestos similares se ha utilizado bromoalquilcromonas, sulfuro de carbono y aminas secundarias.[1]

Resultados y Conclusiones: El CS_2 es un compuesto altamente contaminante y de uso restringido, por ello se lo reemplazó por su equivalente sintético (Esquema 1). La bromometil cromona (**2**) obtenida por halogenación de la metilcromona (**1**) se hizo reaccionar con la sal de sodio del ácido N,N-dietilditiocárbamico, obteniéndose el producto deseado (**3**). Este derivado fue caracterizado mediante espectroscopia vibracional (IR, Raman), UV-vis y RMN (^{1}H y ^{13}C) y la asignación de los respectivos espectros fue asistida por cálculos químico cuánticos. Se resolvió su estructura cristalina por difracción de rayos-X determinándose que la conformación adoptada en el cristal está en buen acuerdo con la conformación calculada de mínima energía. En el empaquetamiento molecular predominan las interacciones tipo puente de hidrogeno intra- e intermoleculares (Fig. 1a) y contactos no convencionales, F···F y F···O, (Fig. 1b).

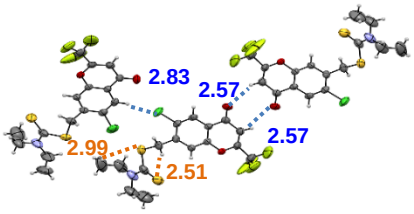

Fig. 1a. Interacciones intra- e intermoleculares

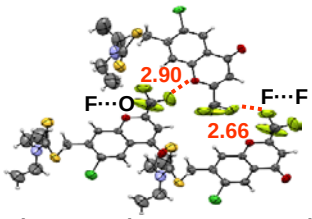

Fig. 1b. Interacciones no convencionales

Referencias Bibliográficas:

1) Huang, W., Ding, Y., Miao, Y., Liu, M. Z., Li, Y., Yang, G. F., *Eur. J. Med. Chem.*, **2009**, 44 (9), 3687–3696.

2) Jagadhani, S. G., Kundalikar, S. G., Karale, B. K., *Orient. J. Chem*., **2014**, 30 (4), 2073–2076.
3) Kirk, K. L., *Org. Process Res. Dev*., **2008**, 12 (2), 305–321.