XXIII CAFQI

XXIII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA

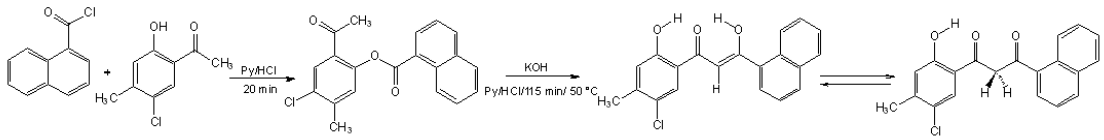
EL CALAFATE 2023

ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO Y ESTRUCTURAL DEL TAUTÓMERO ENOL DE UNA NUEVA 1,3-PROPANODIONA DIARIL SUSTITUIDA

Salvador Vallejo Lorena E.[1], Jios Jorge L.[2] y Ulic Sonia E.[1,3]

[1]CEQUINOR (CONICET, CIC, UNLP), Bvd. 120 N°1465, (1900) La Plata, Argentina; [2]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; [3]Departamento de Cs. Básicas, UNLu, Rutas 5 y 7, Luján, Argentina. lorenasalvador@quimica.unlp.edu.ar

Dentro de la familia de los compuestos β-dicarbonílicos se encuentran las β-dicetonas, que son compuestos con propiedades químicas distintivas debido al tautomerismo ceto-enol que presentan.[1] Las β-dicetonas son importantes en química orgánica, inorgánica y de coordinación, como también en la industria farmacéutica ya que se usan como precursores en la síntesis de compuestos heterocíclicos.[2] Estos compuestos poseen una alta capacidad de formar compuestos de coordinación (principalmente con los metales de la primera serie de transición) gracias a la carga negativa del anión β-dicetonato.[3] La presente β-dicetona, 1-(5-cloro-4-metil-2-hidroxifenil)-3-α-naftil-1,3-propanodiona, se obtiene después del reordenamiento de Baker-Venkataraman realizado sobre el éster obtenido a partir de la reacción del cloruro de ácido α-naftoico y 5-cloro-4-metil-*o*-hidroxiacetofenona, como se muestra en el Esquema 1.



Esquema 1

Este nuevo compuesto se caracterizó mediante espectroscopia vibracional (IR, Raman), UV-Vis y de RMN (^{1}H y ^{13}C). Se realizó el análisis conformacional mediante cálculos químico-cuánticos de manera de determinar la estructura más estable que puede adoptar la molécula en el vacío. La elucidación estructural en solución se realizó mediante la asignación completa de señales por espectroscopia de RMN (^{1}H y ^{13}C). Los resultados señalan que el tautómero ceto-enol es el predominante en solución (CD_3Cl), observándose una señal de carbono carbonílico a 194,5 ppm y una señal a 181,2 ppm atribuida al carbono de enol C=C-OH, mientras que la banda IR en 1569 cm^{-1} se asignó al estiramiento carbonílico y la banda en 1602 cm^{-1} al estiramiento C=C cm^{-1}. Por otro lado, el protón vinílico en el espectro de ^{1}H presenta una señal intensa a 6,59 ppm, (1H). Sin embargo, también se detectaron dos señales de baja intensidad a 4,72 ppm y 11,80 ppm que corresponden al metileno ($-CH_2-$) y al OH fenólico, respectivamente, del tautómero diceto en equilibrio. De la integración de estas señales se puede calcular que este tautómero está presente en aproximadamente un 8%. Las transiciones electrónicas fueron asignadas con la asistencia de cálculos teóricos.

1) Kljun, J., Turel, I., *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2017**, 1655-1666.
2) Urbaniak, W., Jurek, K., Witt, K., Gorączko, A., *Chemik*, **2011**, 65(4), 273-282.

3) De Gonzalo, G., Alcántara, A., *Pharmaceuticals*, **2021**, 14, 1043.