



ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y ESPECTROSCÓPICO DE UNA NUEVA BASE DE SCHIFF DERIVADA DEL SULFAMETOXAZOL

Salomón F.F.1, Echeverría G.A.2, Piro O.E.2, Pérez H.3, Ben Altabef A.1, Gil Diego1

1 INQUINOA (CONICET-UNT). Instituto de Química Física. Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia. Universidad Nacional de Tucumán. San Lorenzo 456. T4000CAN. San Miguel de Tucumán.

2 Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de La Plata e IFLP (CONICET, CCT-La Plata). C.C. 67. 1900. La Plata, Buenos Aires.

3 Departamento de Química Inorgánica. Facultad de Química. Universidad de La Habana. 10400. Cuba. altabef@fbqf.unt.edu.ar

Introducción: En el presente trabajo se describe la síntesis y caracterización estructural y espectroscópica de una nueva base de Schiff derivada del antibiótico Sulfametoxazol. Las bases de Schiff exhiben una amplia variedad de aplicaciones biológicas, tales como actividad anti-bacteriana, anti-fúngica y anti-proliferativa, por lo que su estudio estructural y espectroscópico es de sumo interés [1].

Resultados: La base de Schiff (BA-SMX) fue sintetizada por reacción entre soluciones etanólicas de 4-(dimetilamino) benzaldehído y sulfametoxazol a 80 °C. El sólido formado fue caracterizado mediante RMN de ^1H y ^{13}C y por espectroscopias de IR, Raman y UV-visible. Se resolvió la estructura cristalina por difracción de rayos-X y se estudiaron las interacciones intermoleculares mediante el análisis de las superficies de Hirshfeld (SH). El compuesto cristaliza en el grupo espacial monoclinico P21/n, con $a=15,7553(5)$ Å, $b=6,9061(2)$ Å, $c=18,6278(5)$ Å, $\beta=110,789(3)^\circ$ y $Z=4$ fórmulas por celda unidad. En el cristal, las moléculas adoptan una configuración E con respecto al doble enlace C=N del grupo azometina. Se estudiaron las interacciones intermoleculares mediante el análisis de las SH y las huellas dactilares 2D asociados a ellas. Este estudio indica que las interacciones $\text{H}\cdots\text{H}$ son las que más contribuyen a la SH y además la estructura cristalina muestra una evidente estabilización mediante enlaces de hidrógeno no convencionales del tipo $\text{C-H}\cdots\text{N}$, $\text{C-H}\cdots\text{O}$ y $\text{C-H}\cdots\text{C}$. El empaquetamiento cristalino también se caracteriza por interacciones del tipo $\pi\cdots\pi$ entre los anillos de 5 miembros, con distancias centroide- centroide de 3.926(1) Å. Los parámetros geométricos, frecuencias vibracionales, transiciones electrónicas y desplazamientos químicos de RMN obtenidos mediante cálculos químico cuánticos usando métodos DFT y diferentes conjuntos de funciones base, muestran muy buena concordancia con los datos experimentales.

Conclusiones: Se presentan estudios de la estructura y propiedades espectroscópicas de una nueva base de Schiff, complementados con cálculos químico cuánticos por DFT.

Referencias:

1) Dhar D. N., Taploo C. L., J. Sci. Ind. Res., 1982, 41, 501.