



ANÁLISIS DE LAS ESTRUCTURAS DE DIFRACCIÓN DE RAYOS-X DE BENZOTIAZOLILISO-TIOUREAS DERIVADAS DE AMINOÁCIDOS

ALEJANDRO CRUZ¹, María Esther Bautista-Ramírez² y Efrén V. García-Báez²

1 Instituto Politécnico Nacional-UPIBI, 2 Instituto Politécnico Nacional- UPIBI. alcralmx@hotmail.com

En este trabajo se presenta el análisis de las estructuras de cuatro benzotiazolilisotiurea metil esterés 6 ópticamente activos derivados de aminoácidos que se sintetizaron por reacción del 2-ditiometilcarboimidatobenzotiazol 2 con los carboxilatos de los correspondientes aminoácidos, seguido de una metilación con yoduro de metilo en agitación de DMF como disolvente. Los compuestos 6 precipitaron, se filtraron y se cristalizaron de etanol, se seleccionaron cristales adecuados para su difracción. las estructuras de los compuestos 6 se analizaron por difracción de rayos-X de monocristal. En general, las estructuras de los compuestos 6 presentaron isomería E, lo que confirma la estereoquímica de la reacción. Las estructuras de los compuestos 6a y 6c se estabilizan por interacciones por puente de hidrógeno del tipo tricentrico entre el amino NH con el átomo de nitrógeno del anillo del benzotiazol y con el átomo de oxígeno de grupo carbonilo, formando dos anillos intramoleculares S(6) y S(5), respectivamente. El análisis de las estructuras en estado sólido, permitió proponer la asistencia del puente de hidrógeno en la estereoquímica de la reacción