



REVISTA DE LA ACADEMIA  
COLOMBIANA DE CIENCIAS  
EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES

[www.raccefyn.co](http://www.raccefyn.co)

## Información suplementaria

**Las chalconas y su uso como precursores en la síntesis de compuestos  
heterocíclicos nitrogenados**

Chalcones and their use as precursors in the synthesis of nitrogen-containing  
heterocyclic compounds

**Braulio Insuasty-Obando**

Braulio Insuasty-Obando, braulio.insuasty@correounivalle.edu.co

## Contenido

**Figura 1S.** Síntesis de flavonas **3** a partir de *orto*-hidroxichalconas **2**.

**Figura 2S.** Adición directa (**A**) y conjugada (**B**) de un nucleófilo sobre un sistema carbonílico  $\alpha,\beta$ -insaturado.

**Figura 3S.** Formación de chalconas en medio ácido o básico.

**Figura 4S.** Obtención de las chalconas **13/14** derivadas de la 7-cloroquinolina.

**Figura 5S.** Nuevas (*E*)-1-aril-3-(3-aril-1-fenil-1*H*-pirazol-4-il)-2-propen-1-onas **17/18** a partir de 3-aril-1-fenilpirazol-4-carboxaldehídos **15/16**.

**Figura 6S.** Síntesis de derivados de tipo bis-chalconas **21** tratando las dicetonas **19/20** con aldehídos aromáticos **12a-c**.

**Figura 7S.** Obtención de metilen-bis-chalconas **23a-e** partiendo de acetofenonas sustituidas **8** y 5,5'-metilen-bis-salicilaldehído **22**.

**Figura 8S.** Nuevos derivados hetaril- y alquilidenrodaninas **26a-d**, **26e**, **27a-d**, **28a-d**, **28e**, y **29a-d** preparados a partir de aldehídos heterocíclicos **24a-d** o acetaldehído **24e**.

**Figura 9S.** Síntesis asistida por microondas de nuevas (*Z*)-5-arilidenrodaninas **30a-i**.

**Figura 10S.** Estructura y nomenclatura IUPAC de isómeros de las pirazolininas.

**Figura 11S.** Síntesis y funcionalización de una nueva serie de *NH*-pirazolininas **37** mediante la reacción entre [(7-cloroquinolin-4-il)oxi]chalconas **36** con hidrato de hidrazina.

**Figura 12S.** Obtención de los compuestos **41a-f** y posterior tratamiento con anhídrido acético o ácido fórmico.

**Figura 13S.** Nuevas series de *N*-acetil- **44** y *N*-formil-pirazolininas **45/46** sintetizadas por reacción entre [(7-cloroquinolin-4-il) amino] chalconas **13/14** con hidrato de hidrazina en ácido acético y ácido fórmico.

**Figura 14S.** Síntesis de nuevas 2-pirazolininas 1,3,5-trisustituidas conteniendo el residuo de benzodioxol.

**Figura 15S.** Síntesis asistida por microondas de los 3-aril-4-(3-aril-4,5-dihidro-1*H*-pirazol-5-il)-1-fenil-1*H*-pirazoles racémicos **55** o sus *N*-acetil derivados **56/57**.

**Figura 16S.** Nuevos derivados bis-3,5-difenilpirazolínicos **58a-f** sintetizados a partir de la reacción entre bis-chalconas enlazadas por un grupo alquilo **21a-f** e hidrazina en ácido acético.

**Figura 17S.** Síntesis de nuevas series de 4,4'-metilenbis [2-(3-aril-4,5-dihidro-1*H*-pirazol-5-il) fenoles] **59** y metilenbis-2-(3-aril-4,5-dihidro-1*H*-pirazol-5-il)-4,1-fenilen diacetatos **60**.

**Figura 18S.** Formación de derivados dihidropiridínicos fusionados a partir de chalconas.

**Figura 19S.** Condensación de aminopirazoles *NH*-sustituídos **61** y *NH*-no sustituidos **62** con chalconas **1** y posterior aromatización de los productos con NBS.

**Figura 20S.** Estructuras de los isómeros de diazepinas.

**Figura 21S.** Formación de benzodiazepinas por medio de la reacción entre *orto*-fenilendiamina y chalconas.

**Figura 22S.** Formación de regioisómeros por la reacción entre *orto*-diaminas con dos grupos amino no equivalentes y chalconas.

**Figura 23S.** Formación de dihidrodiazepinas fusionadas a partir de chalconas.

**Figura 24S.** Obtención de nuevas series de 8,9-dihidro-7*H*-pirimido [4,5-*b*][1,4] diazepinas **84a-g** y **85a-g**.

**Figura 25S.** Síntesis de nuevas 2-alquilamino-6-aril-8,9-dihidropirimido [4,5-*b*][1,4] diazepin-4(7*H*)-onas **88a-o** usando dimetilaminopropiofenonas (bases de Mannich) **87a-f**.

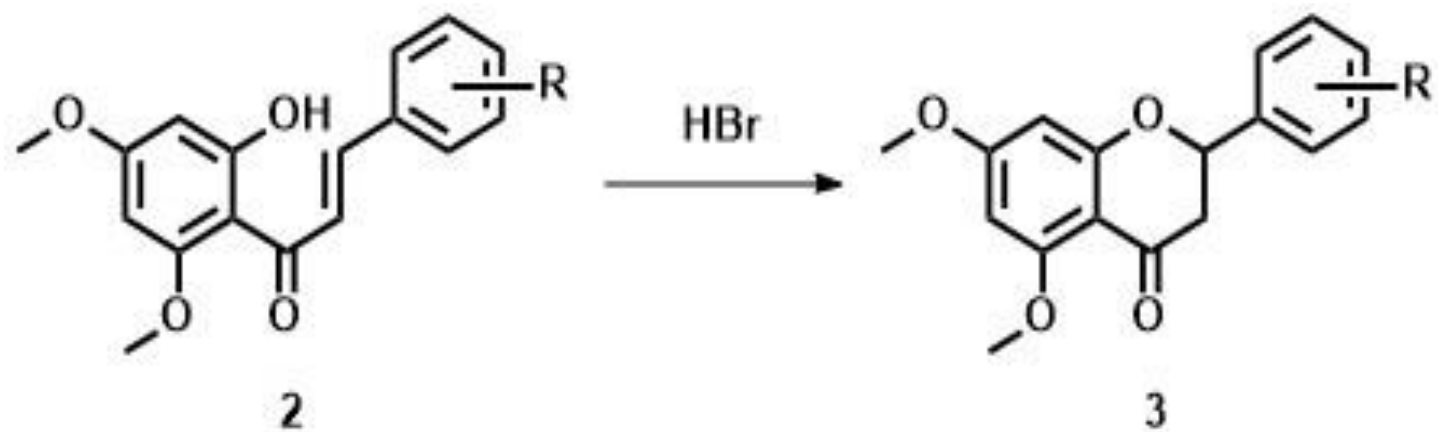
**Figura 26S.** Obtención de tres series de nuevas 8,9-dihidro-7*H*-pirimido [5,4-*b*][1,4] diazepinas, **90a-d**, **91a-d**, y **92a-d**.

**Figura 27S.** Síntesis de las 6,6a,7,8-tetrahidro-5*H*-nafto[1,2-*e*]pirimido[4,5-*b*][1,4]diazepinas **94a-f** y **95a-f** usando radiación de microondas y cantidades catalíticas de BF<sub>3</sub>·OEt<sub>2</sub>.

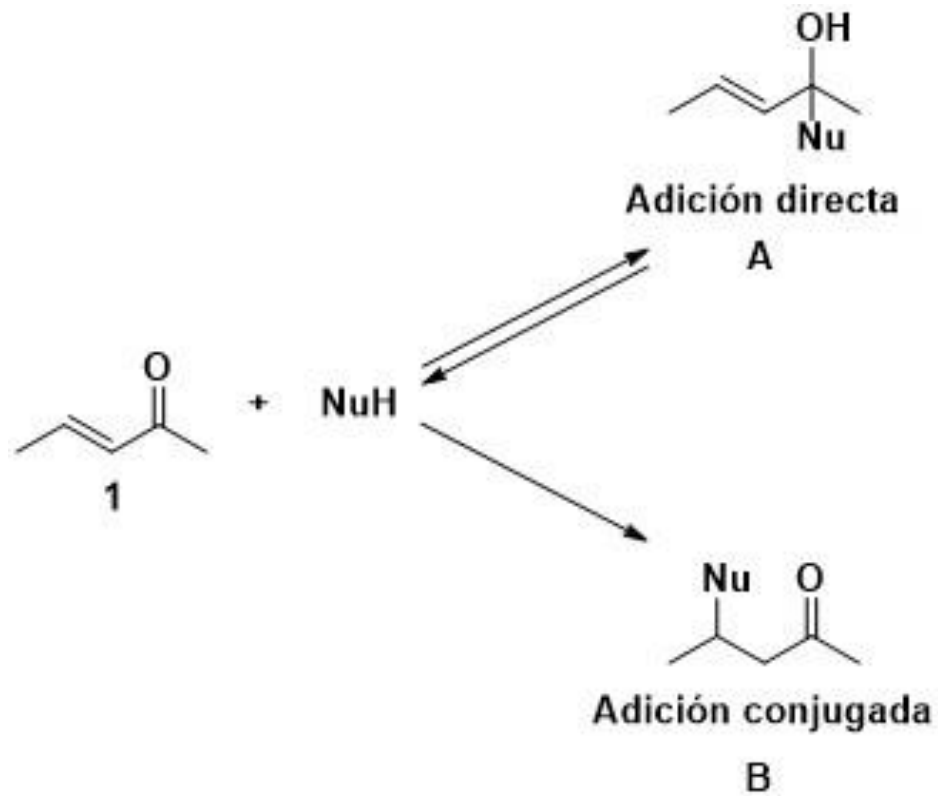
**Figura 28S.** Formación de nuevas diazepinas fusionadas derivadas de la indandiona.

**Figura 29S.** Nuevas indeno [1,2-*e*] pirimido [4,5-*b*][1,4]diazepin-5,11-dionas racémicas **101-127** obtenidas regioselectivamente a partir de 2-arilidenindandionas **98**.

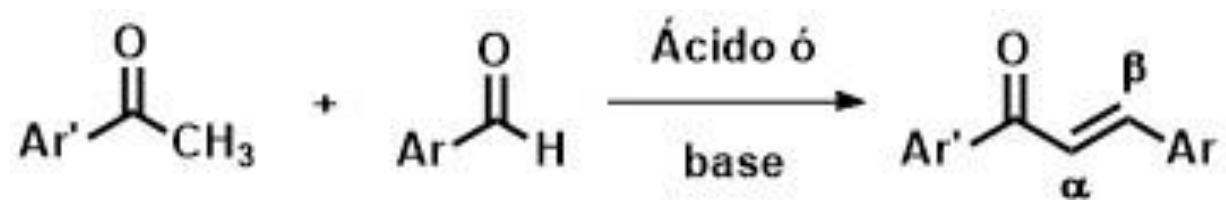
**Figura 30S.** Síntesis de nuevas 4-amino-6-aril-8-(1,3-benzodioxol-5-il)-8,9-dihidro-7*H*-pirimido [4,5-*b*][1,4] diazepinas **128a-f** y 4-amino-8-aril-6-(1,3-benzodioxol-5-il)-8,9-dihidro-7*H*-pirimido[4,5-*b*][1,4]diazepinas racémicas **129a-f**.



**Figura 1S.** Síntesis de flavonas **3** a partir de *ortho*-hidroxichalconas **2**.

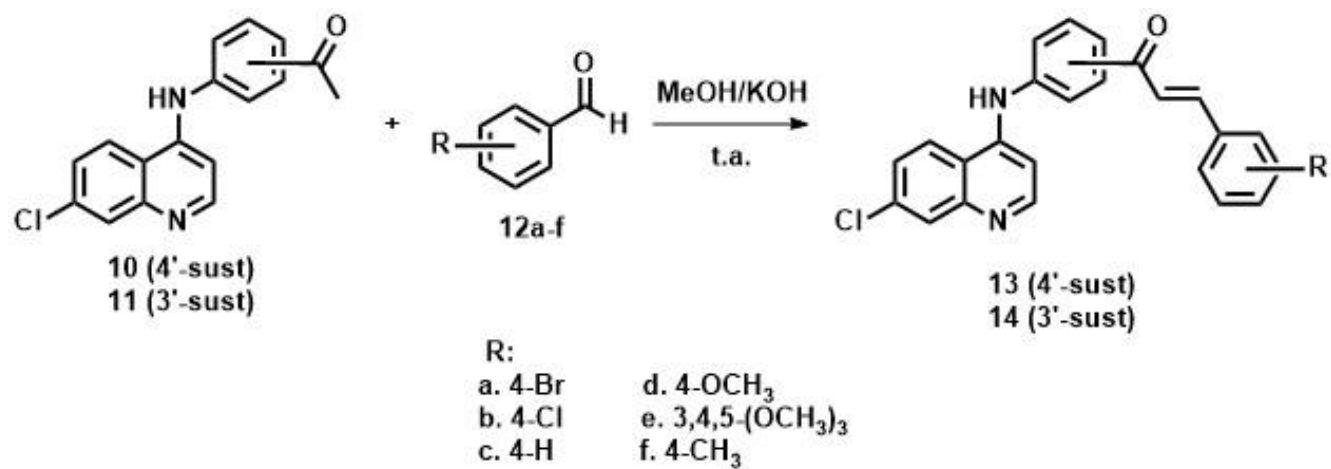


**Figura 2S.** Adición directa (**A**) y conjugada (**B**) de un nucleófilo sobre un sistema carbonílico  $\alpha,\beta$ -insaturado.

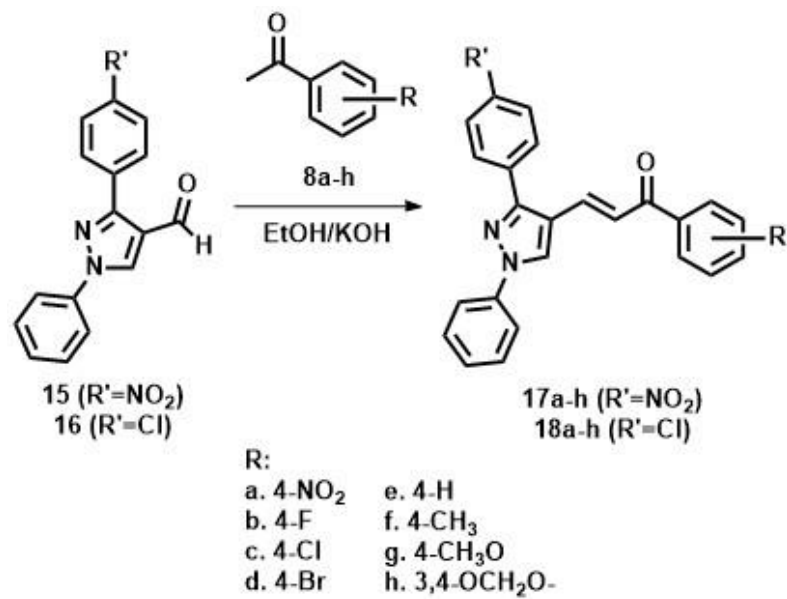


**Figura 3S.** Formación de chalconas en medio ácido o básico.

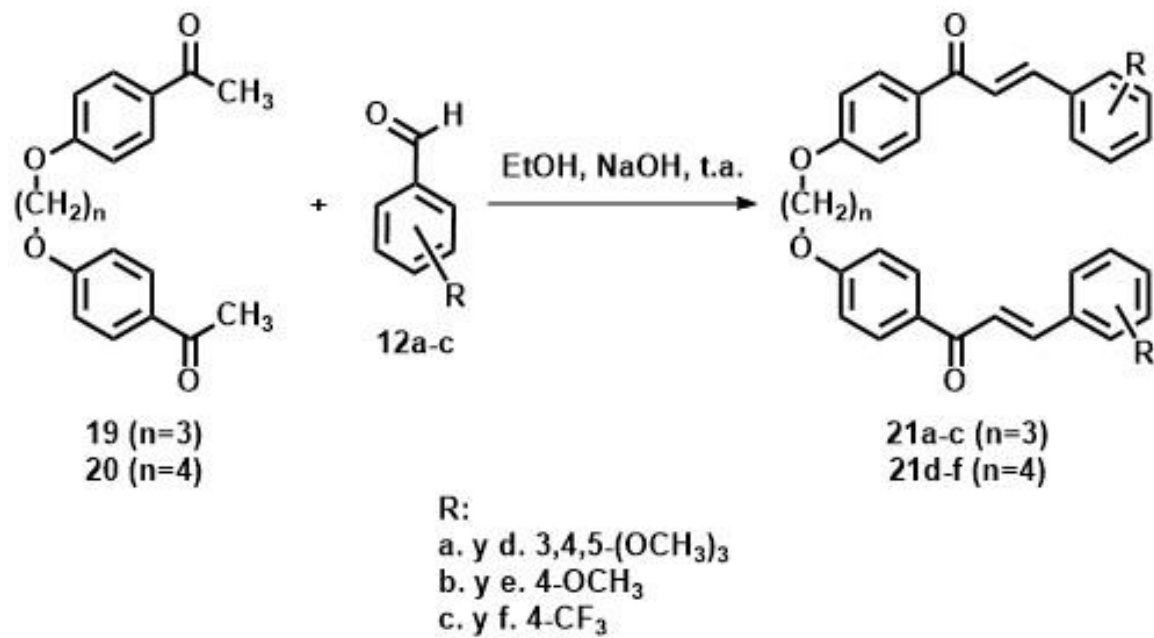




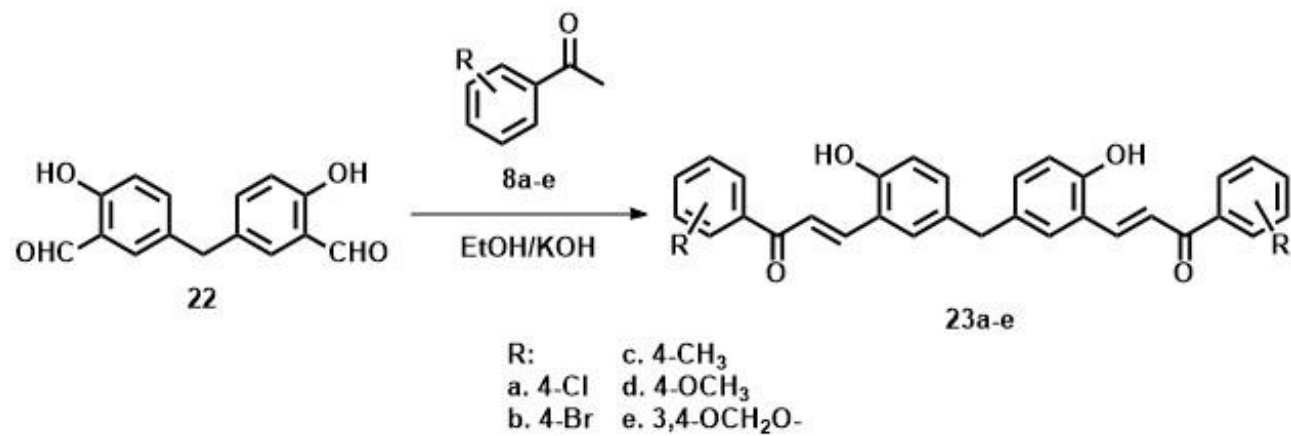
**Figura 4S.** Obtención de las chalconas **13/14** derivadas de la 7-cloroquinolina.



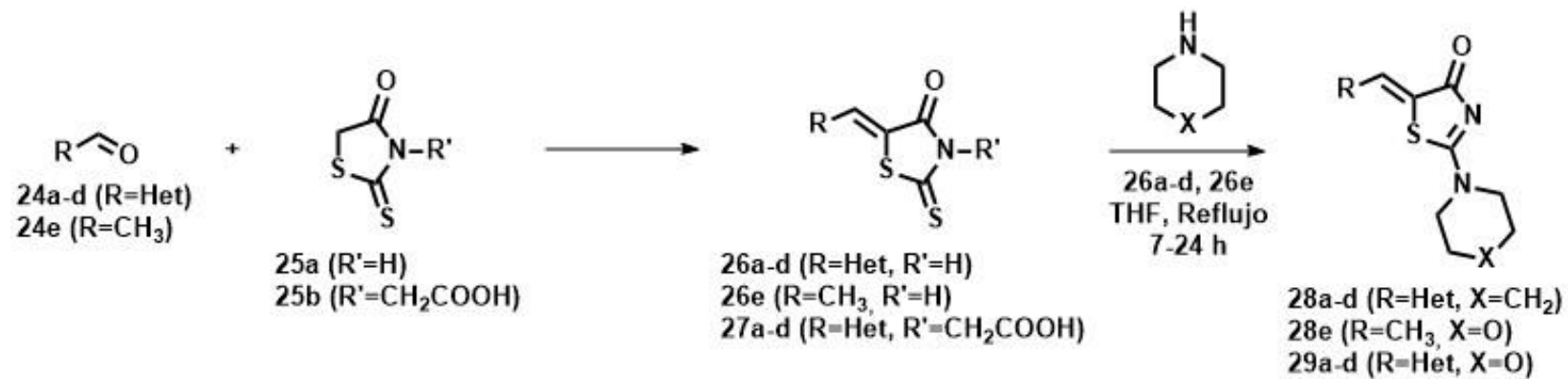
**Figura 5S.** Nuevas (*E*)-1-aryl-3-(3-aryl-1-fenil-1*H*-pirazol-4-il)-2-propen-1-onas **17/18** a partir de 3-aryl-1-fenilpirazol-4-carboxaldehídos **15/16**.



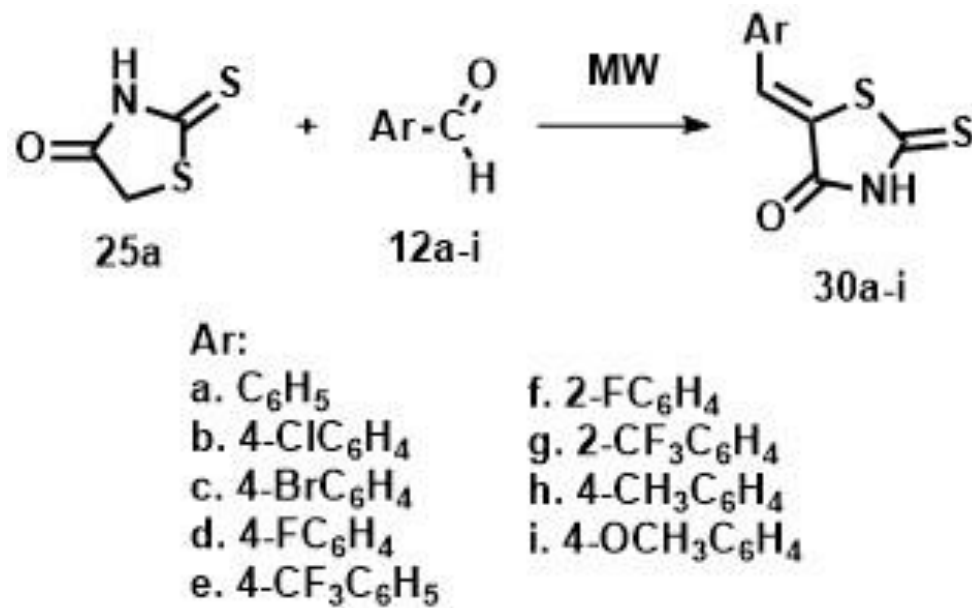
**Figura 6S.** Síntesis de derivados de tipo bis-chalconas **21** tratando las dicetonas **19/20** con aldehídos aromáticos **12a-c**.



**Figura 7S.** Obtención de metilen-bis-chalconas **23a-e** partiendo de acetofenonas sustituidas **8** y 5,5'-metilen-bis-salicilaldehído **22**.



**Figura 8S.** Nuevos derivados hetaril- y alquilidenrodaninas **26a-d**, **26e**, **27a-d**, **28a-d**, **28e**, y **29a-d** preparados a partir de aldehídos heterocíclicos **24a-d** o acetaldehído **24e**.

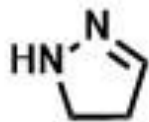


**Figura 9S.** Síntesis asistida por microondas de nuevas (*Z*)-5-arylidenrodaninas **30a-i**.



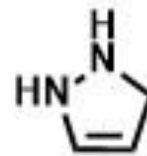
31

4,5-dihidro-3*H*-pirazol  
 $\Delta^1$ -pirazolina



32

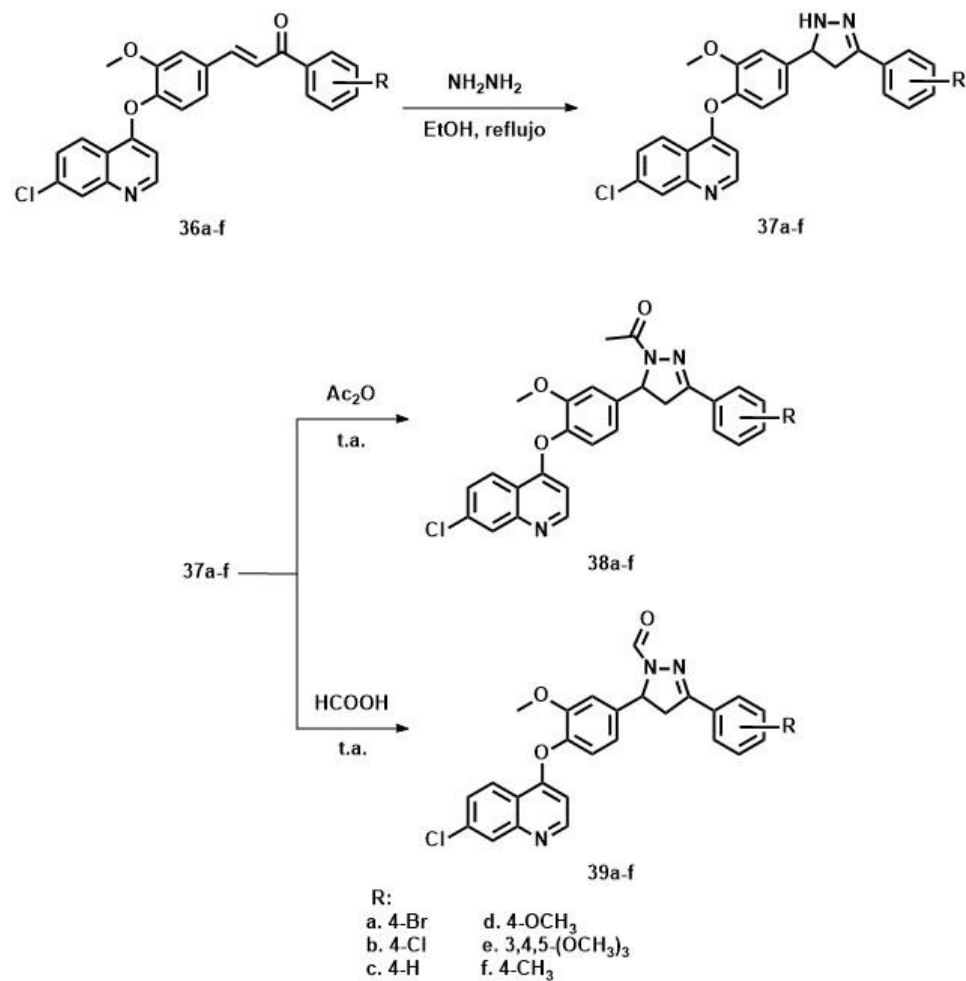
4,5-dihidro-1*H*-pirazol  
 $\Delta^2$ -pirazolina



33

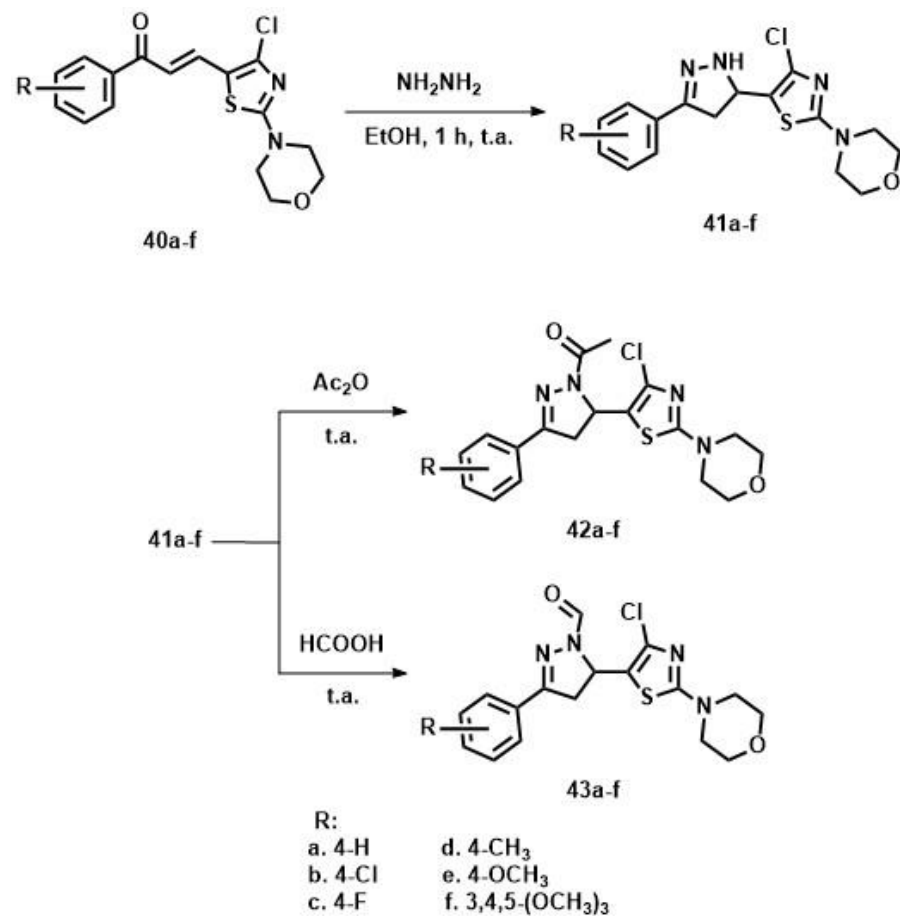
2,3-dihidro-1*H*-pirazol  
 $\Delta^3$ -pirazolina

**Figura 10S.** Estructura y nomenclatura IUPAC de isómeros de las pirazolinas.

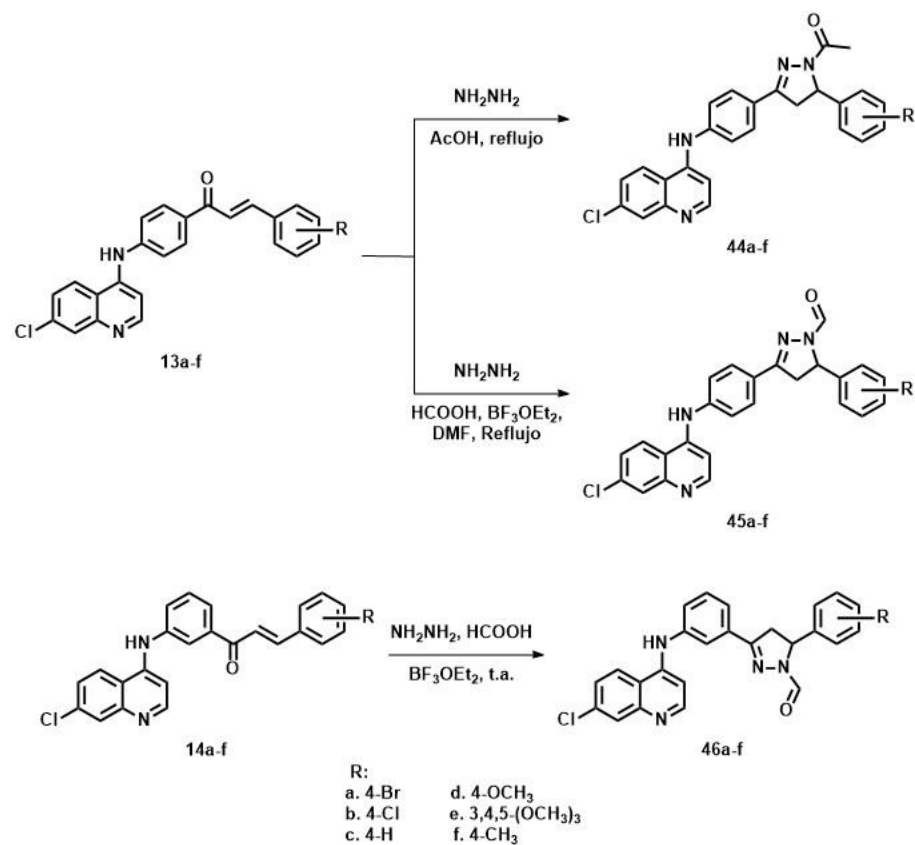


**Figura 11S.** Síntesis y funcionalización de una nueva serie de *NH*-pirazolinas **37** mediante la reacción entre [(7-cloroquinolin-4-il)oxi]chalconas **36** con hidrato de hidrazina.

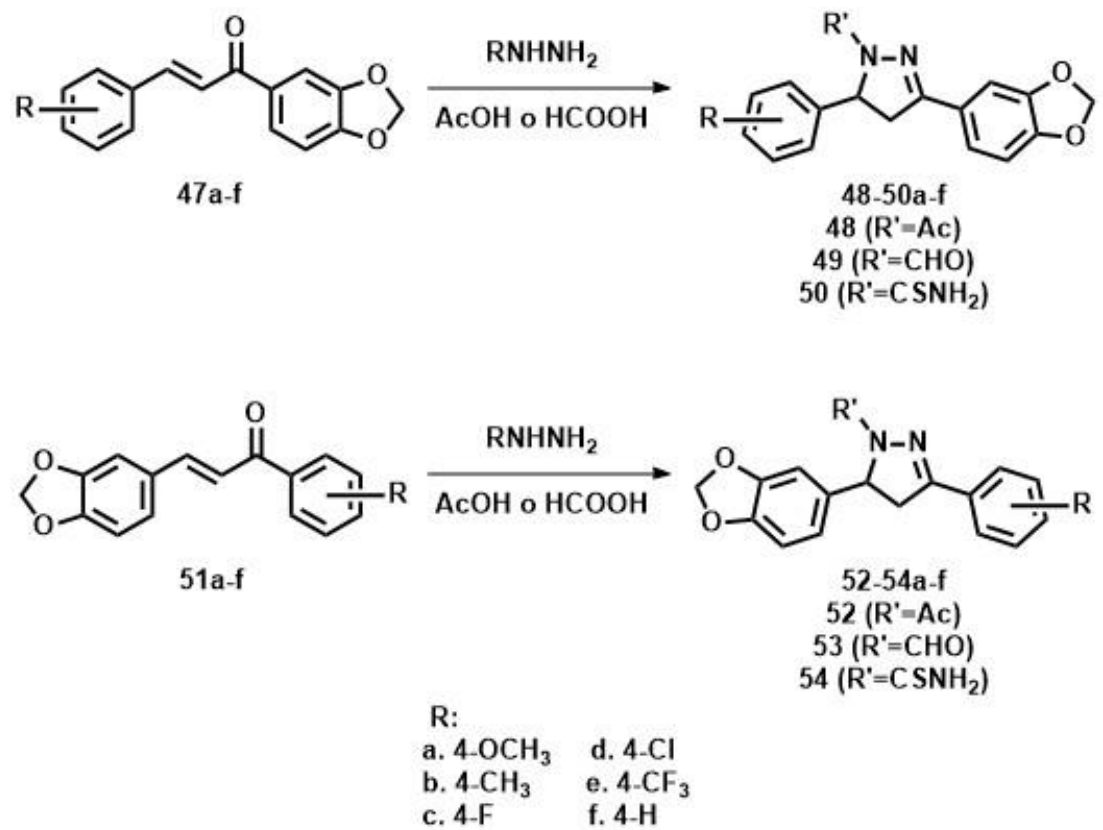




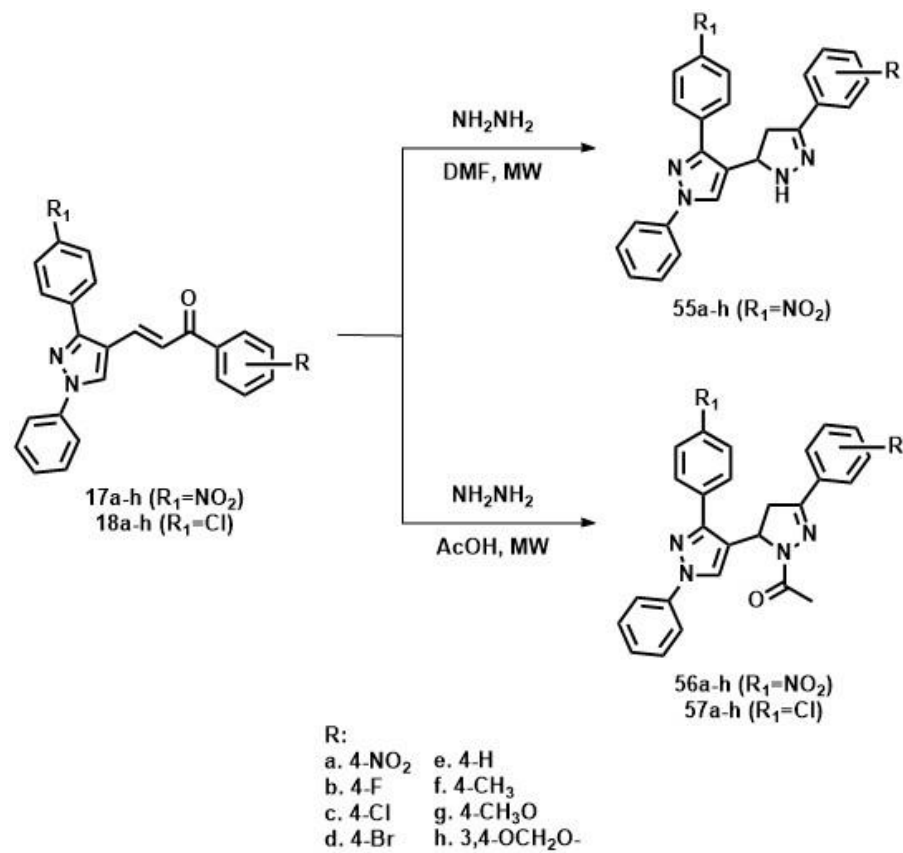
**Figura 12S.** Obtención de los compuestos **41a-f** y posterior tratamiento con anhídrido acético o ácido fórmico.



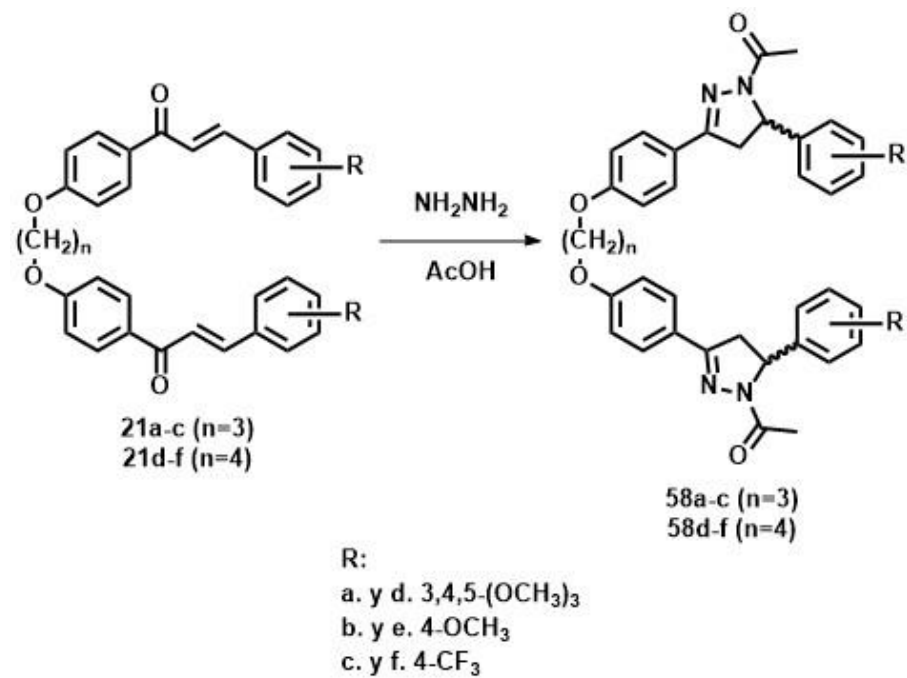
**Figura 13S.** Nuevas series de *N*-acetil- **44** y *N*-formil-pirazolinas **45/46** sintetizadas por reacción entre [(7-cloroquinolin-4-il) amino] chalconas **13/14** con hidrato de hidrazina en ácido acético y ácido fórmico.



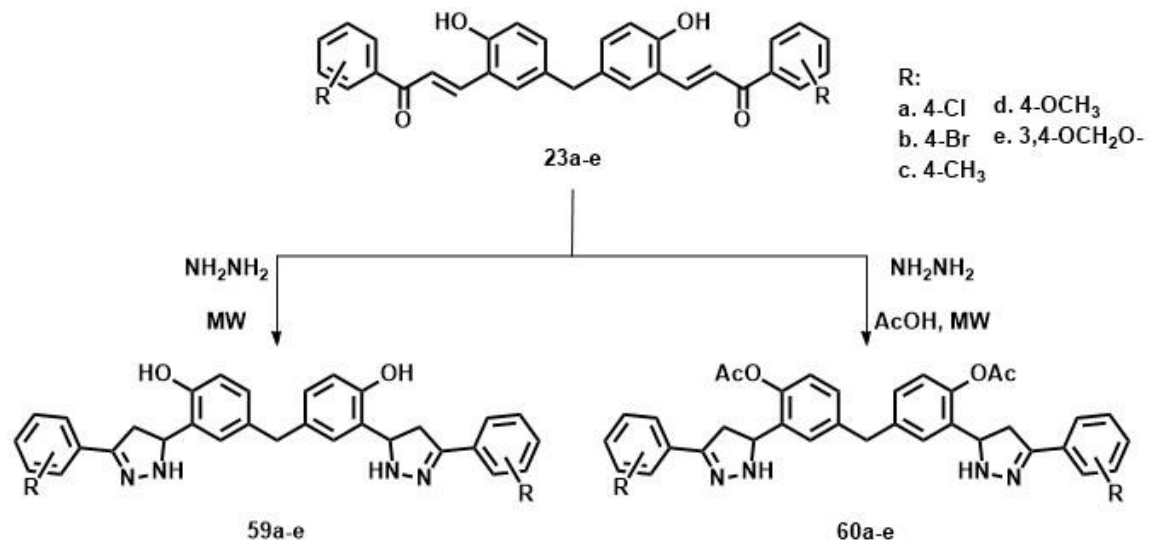
**Figura 14S.** Síntesis de nuevas 2-pirazolinas 1,3,5-trisustituidas conteniendo el residuo de benzodioxol.



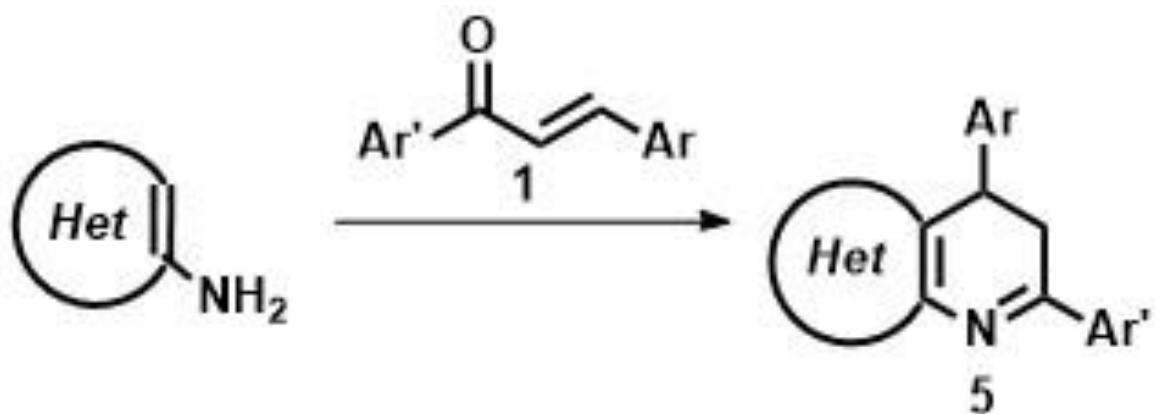
**Figura 15S.** Síntesis asistida por microondas de los 3-aryl-4-(3-aryl-4,5-dihidro-1*H*-pirazol-5-il)-1-fenil-1*H*-pirazoles racémicos **55** o sus *N*-acetil derivados **56/57**.



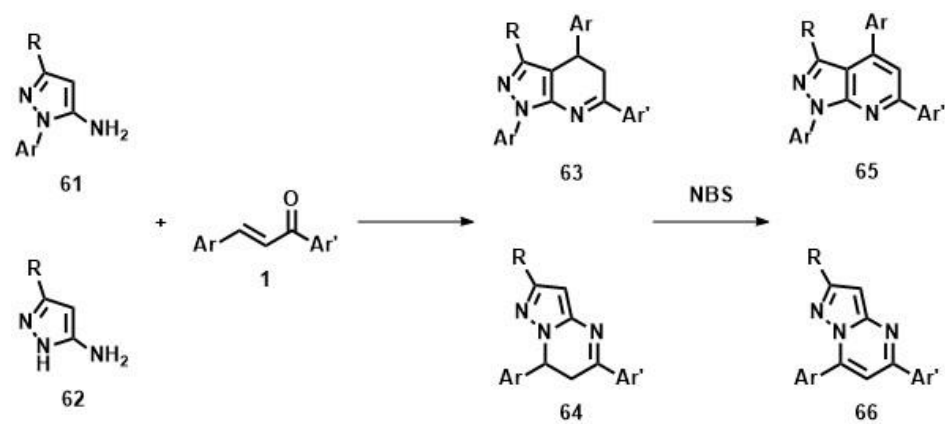
**Figura 16S.** Nuevos derivados bis-3,5-difenilpirazolínicos **58a-f** sintetizados a partir de la reacción entre bis-chalconas enlazadas por un grupo alquilo **21a-f** e hidrazina en ácido acético.



**Figura 17S.** Síntesis de nuevas series de 4,4'-metilenbis [2-(3-aril-4,5-dihidro-1*H*-pirazol-5-il) fenoles] **59** y metilenbis-2-(3-aril-4,5-dihidro-1*H*-pirazol-5-il)-4,1-fenilen diacetatos **60**.

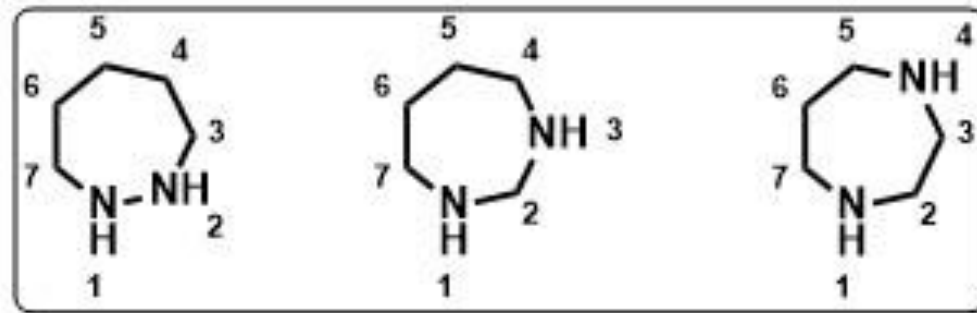


**Figura 18S.** Formación de derivados dihidropiridínicos fusionados a partir de chalconas.

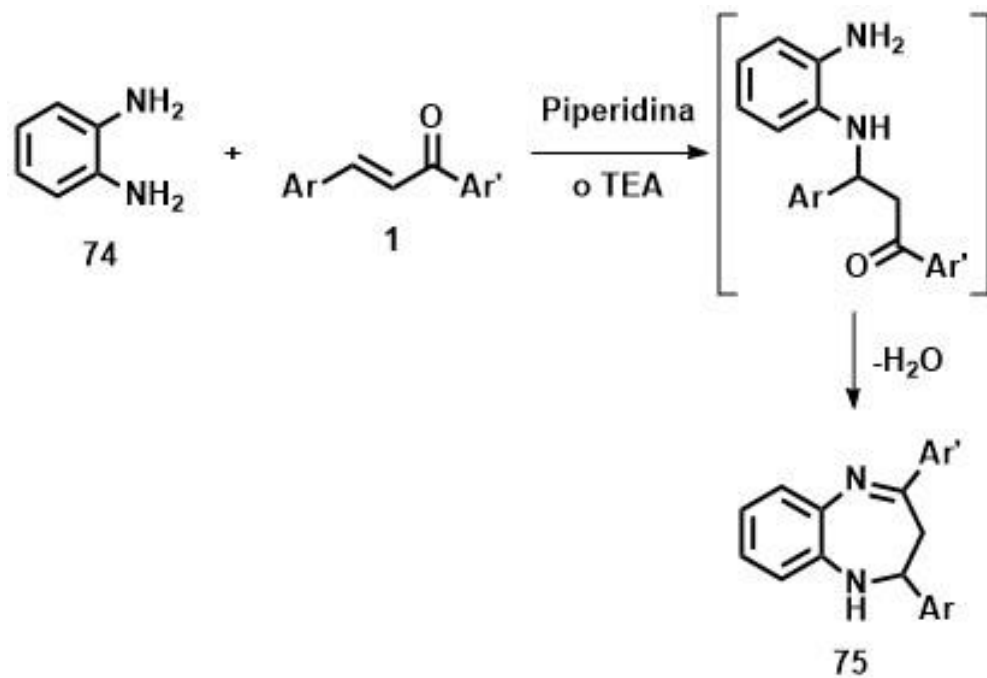


**Figura 19S.** Condensación de aminopirazoles *MH*-sustituidos **61** y *MH*-no sustituidos **62** con chalconas **1** y posterior aromatización de los productos con NBS.

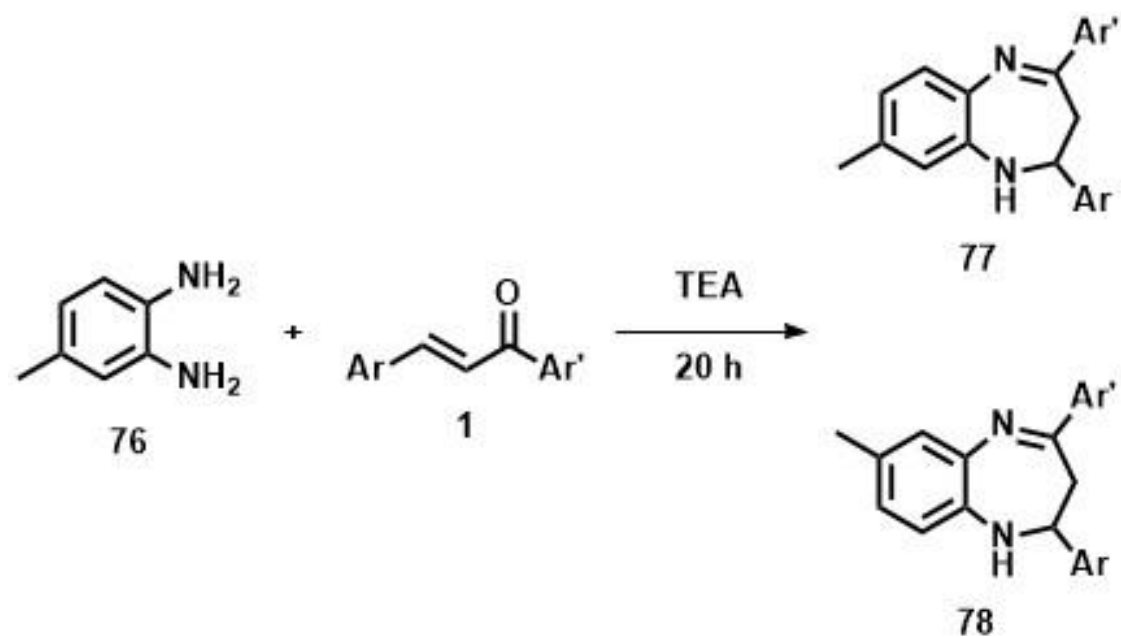




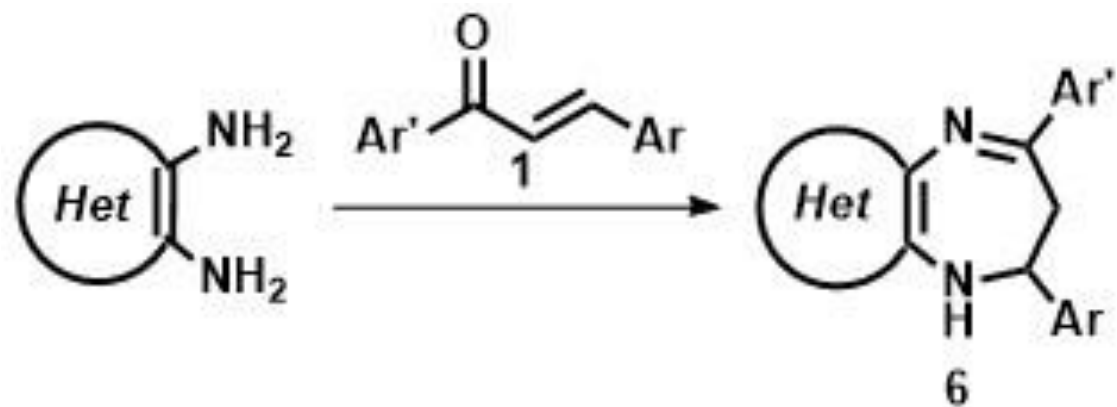
**Figura 20S.** Estructuras de los isómeros de diazepinas.



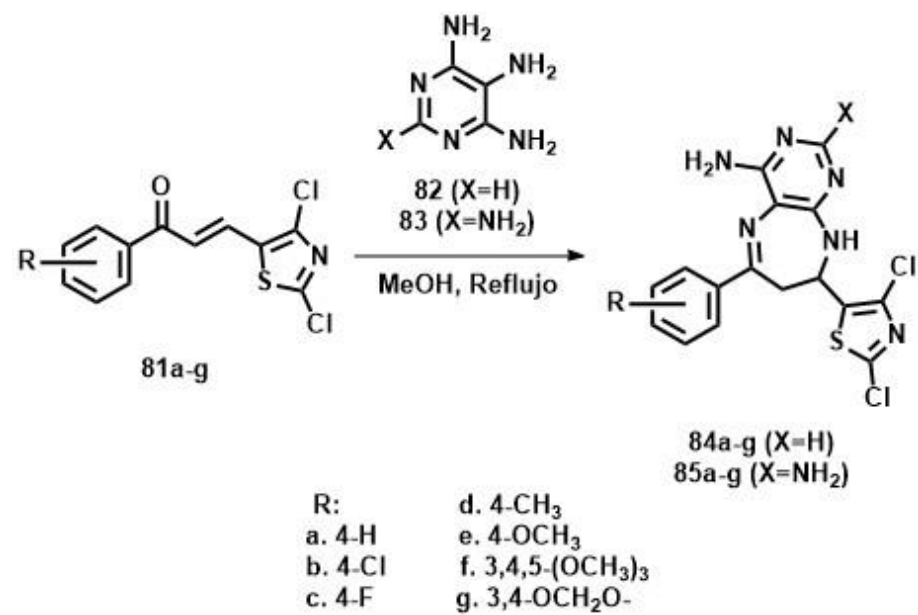
**Figura 21S.** Formación de benzodiazepinas por medio de la reacción entre *ortho*-fenilendiamina y chalconas.



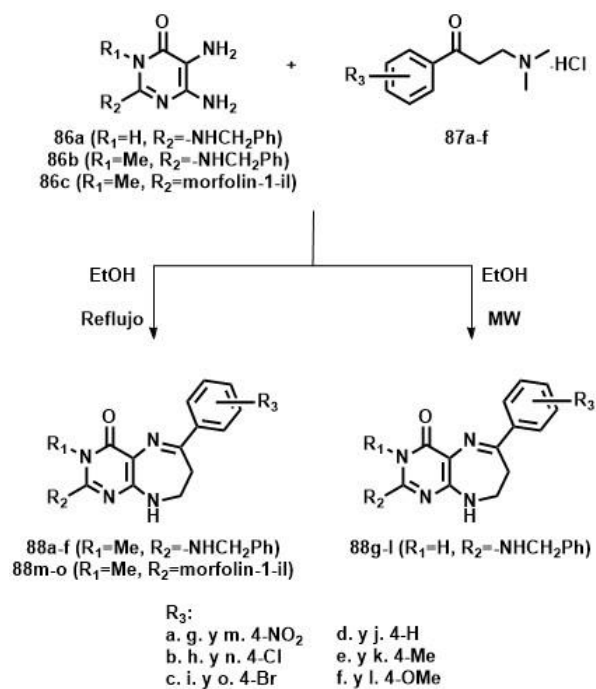
**Figura 22S.** Formación de regioisómeros por la reacción entre *ortho*-diaminas con dos grupos amino no equivalentes y chalconas.



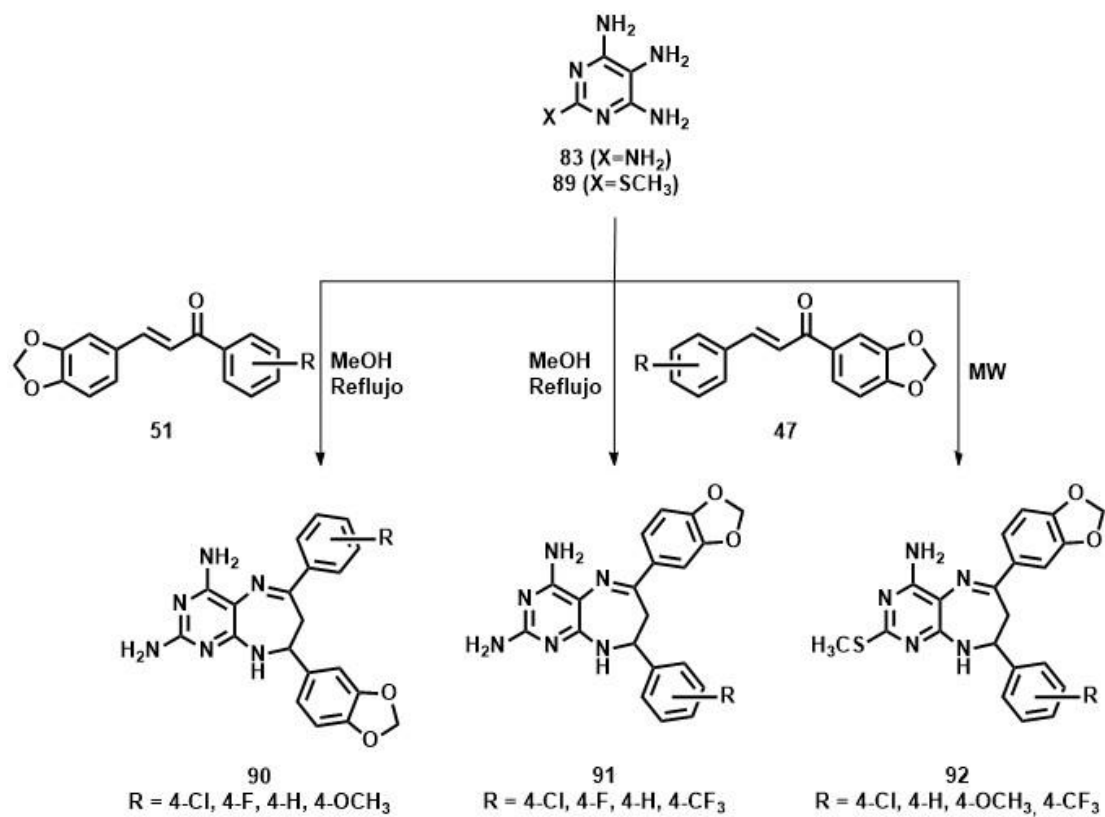
**Figura 23S.** Formación de dihidrodiazepinas fusionadas a partir de chalconas.



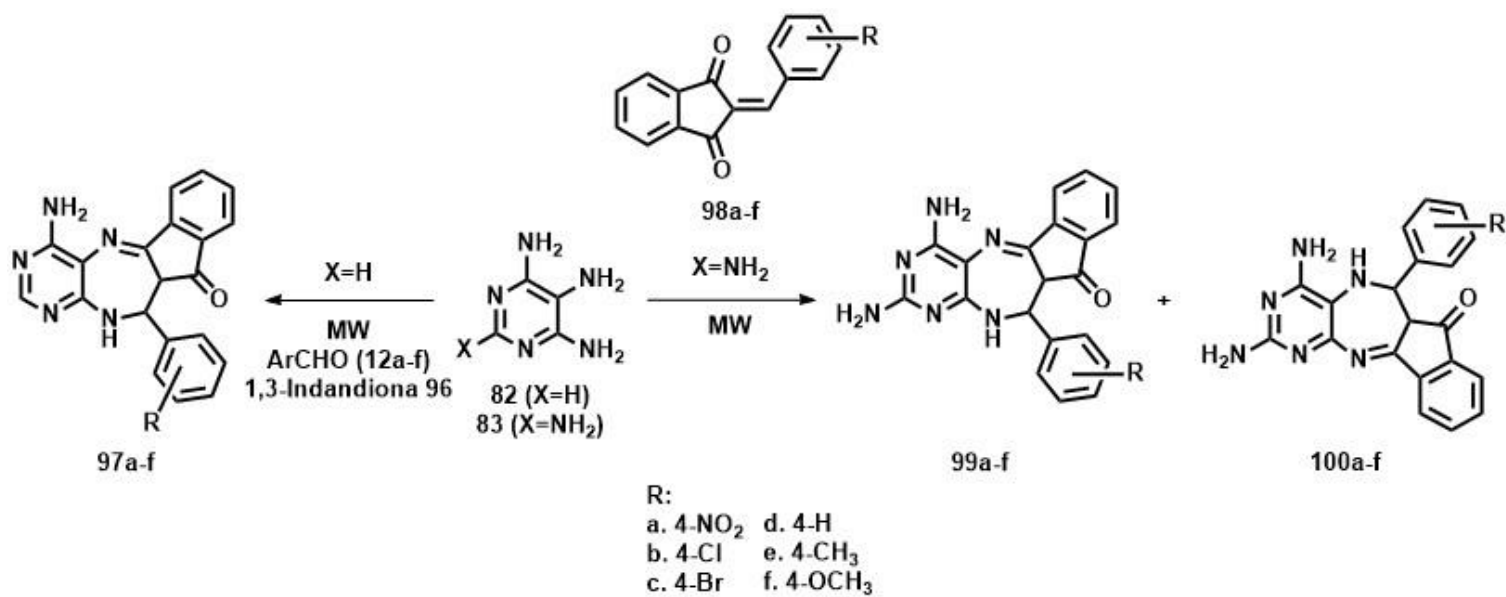
**Figura 24S.** Obtención de nuevas series de 8,9-dihidro-7H-pirimido [4,5-*b*][1,4] diazepinas **84a-g** y **85a-g**.



**Figura 25S.** Síntesis de nuevas 2-alkilamino-6-aril-8,9-dihidropirimido [4,5-*b*][1,4] diazepin-4(7*H*)-onas **88a-o** usando dimetilaminopropiofenonas (bases de Mannich) **87a-f**.

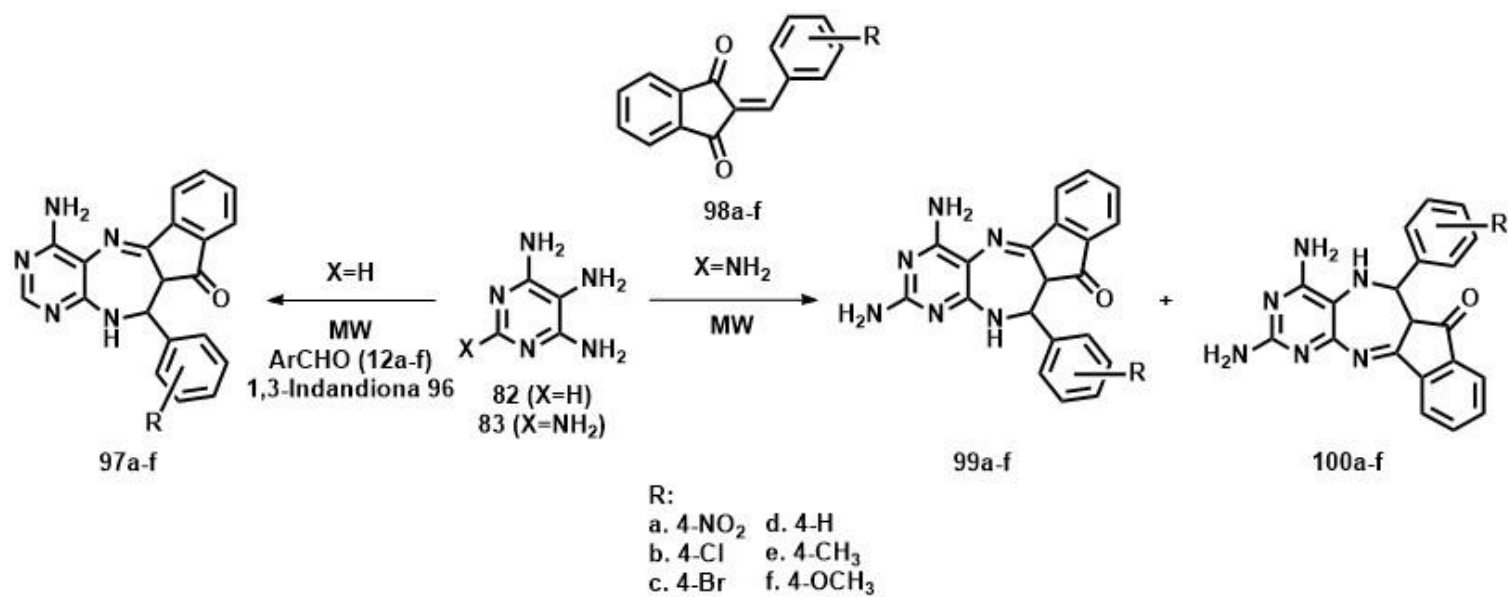


**Figura 26S.** Obtención de tres series de nuevas 8,9-dihidro-7*H*-pirimido [5,4-*b*][1,4] diazepinas, **90a-d**, **91a-d**, y **92a-d**.

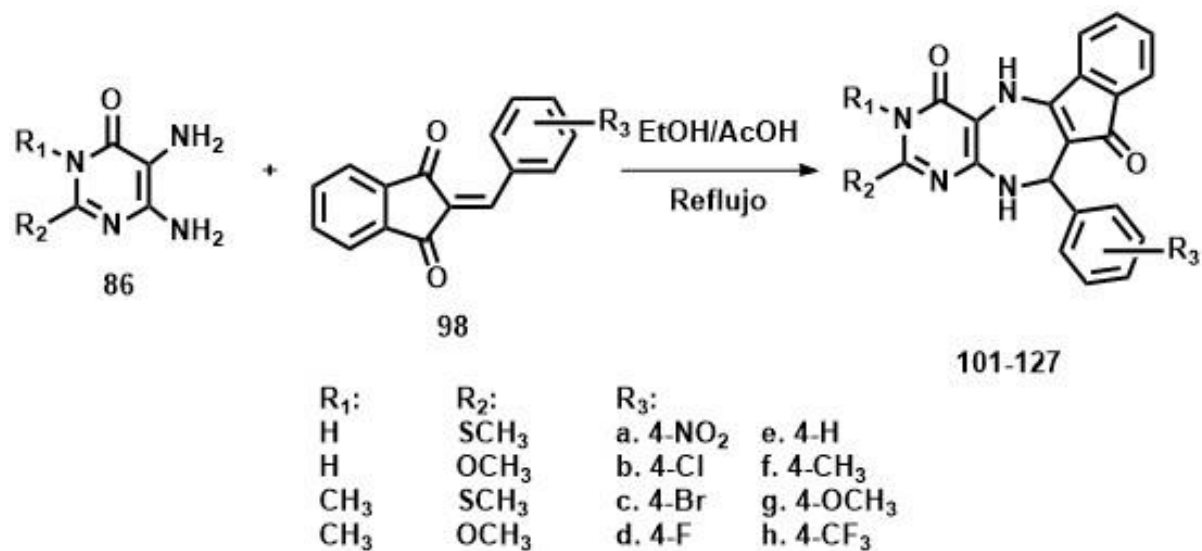


**Figura 27S.** Síntesis de las 6,6a,7,8-tetrahydro-5H-nafto[1,2-e]pirimido[4,5-b][1,4]diazepinas **94a-f** y **95a-f** usando radiación de microondas y cantidades catalíticas de BF<sub>3</sub>·OEt<sub>2</sub>.

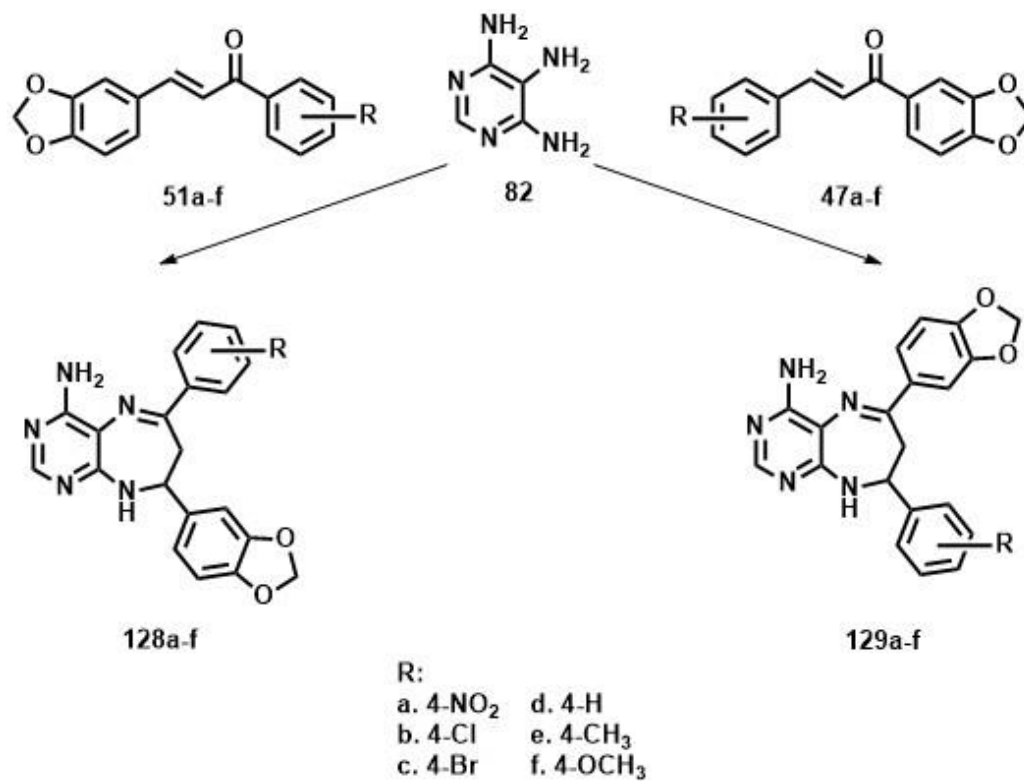




**Figura 28S.** Formación de nuevas diazepinas fusionadas derivadas de la indandiona.



**Figura 29S.** Nuevas indeno [1,2-*e*] pirimido [4,5-*b*][1,4]diazepin-5,11-dionas racémicas **101-127** obtenidas regioselectivamente a partir de 2-arilidenindandionas **98**.



**Figura 30S.** Síntesis de nuevas 4-amino-6-aryl-8-(1,3-benzodioxol-5-il)-8,9-dihidro-7*H*-pirimido [4,5-*b*][1,4] diazepinas **128a-f** y 4-amino-8-aryl-6-(1,3-benzodioxol-5-il)-8,9-dihidro-7*H*-pirimido[4,5-*b*][1,4]diazepinas racémicas **129a-f**.