



THREE NEW THIOSACCHARIN DERIVATIVES GENERATED IN A COMPLEX REACTION SYSTEM

Gustavo A. Echeverría¹, Oscar E. Piro¹, Juan Zinczuk² and Enrique J. Baran^{3,*}

¹ Dto. de Física and IFLP (CONICET), Fac. de Cs Exactas, UNLP, 1900 La Plata, Argentina.

² IQUIR, CONICET/UNR, Fac. de Cs. Bioquímicas y Farmacéuticas, UNR, 2000 Rosario, Argentina.

³ CEQUINOR, CONICET/UNLP, Fac. de Cs. Exactas, UNLP, 1900 La Plata, Argentina.

* Corresponding author: baran@quimica.unlp.edu.ar

Received August 2nd, 2012. Accepted, September 10th, 2012.

Resumen

La reacción entre tiosacarina y etilamina muestra ser relativamente compleja. El producto principal de esta reacción es el 1,1 dióxido de 3-etilamino-1,2 benzisotiazol (**1**), que pudo ser claramente identificado por espectroscopia NMR e IR. El tiosacarinato de etilamonio (**2**) y el 1,1 dióxido de 3-vinilamino-1,2 benzisotiazol (**3**) se generan como subproductos minoritarios de la reacción y sus estructuras pudieron ser determinadas por métodos de difracción de rayos X. La sal (**2**) cristaliza en el sistema monoclinico, grupo espacial $P2_1/c$ con $a=13.1367(5)$, $b=9.9721(4)$, $c=8.8217(3)$ Å, $\beta=99.125(4)^\circ$, y $Z=4$, mientras que el compuesto (**3**) pertenece al grupo espacial $P2_1/m$ con $a=7.1572(5)$, $b=7.0242(7)$, $c=9.5503(8)$ Å, $\beta=95.008(7)^\circ$, y $Z=2$.

Abstract

The reaction between thiosaccharin and ethylamine showed to be relatively complex. The main product of this reaction is 3-ethylamino-1,2-benzisothiazole 1,1-dioxide (**1**), which could be clearly identified by NMR and IR spectroscopies. Ethylammonium thiosaccharinate (**2**) and 3-vinylamino-1,2-benzisothiazole 1,1 dioxide (**3**) were generated as minor by products during this reaction and their structures were determined by X-ray diffraction methods. The (**2**) salt crystallizes in the monoclinic $P2_1/c$ space group with $a=13.1367(5)$, $b=9.9721(4)$, $c=8.8217(3)$ Å, $\beta=99.125(4)^\circ$, and $Z=4$, whereas compound (**3**) belongs to the $P2_1/m$ space group with $a=7.1572(5)$, $b=7.0242(7)$, $c=9.5503(8)$ Å, $\beta=95.008(7)^\circ$, and $Z=2$.

Palabras clave: Reacción tiosacarina/etilamina; 1,1 dióxido de 3-etilamino-1,2-benzisotiazol; tiosacarinato de etilamonio; 1,1 dióxido de 3-vinilamino-1,2-benzisotiazol; estructuras cristalinas

Keywords: *Thiosaccharin/ethylamine reaction; 3-ethylamino-1,2-benzisothiazole 1,1 dioxide; ethylammonium thiosaccharinate; 3-vinylamino-1,2-benzisothiazole 1,1 dioxide; crystal structures.*