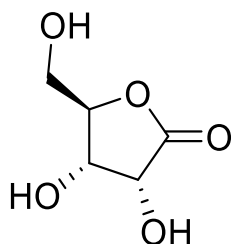


Estudio sintético, propiedades biológicas e implicaciones socio-políticas de nuevos antivirales frente a COVID-19: caso Remdesivir.

Laura V. Gómez-Orozco; Luis D. Isaza-Osorio y Manuela Álvarez-Calle.

INFORMACIÓN SUPLEMENTARIA

- Compuesto 2



Fórmula molecular: $C_5H_8O_5$
Peso molecular: 148.114 g/mol
Punto de fusión: 85°C
Densidad: 62.79 g/mL
Composición: C (40.55%), H (5.44%), O (54.01%)
Refracción molar: $29.59 \pm 0.3 \text{ cm}^3$
Índice de refracción: 1.580 ± 0.02

(3R,4S,5R)-3,4-dihydroxy-5-(hydroxymethyl)dihydrofuran-2(3H)-one

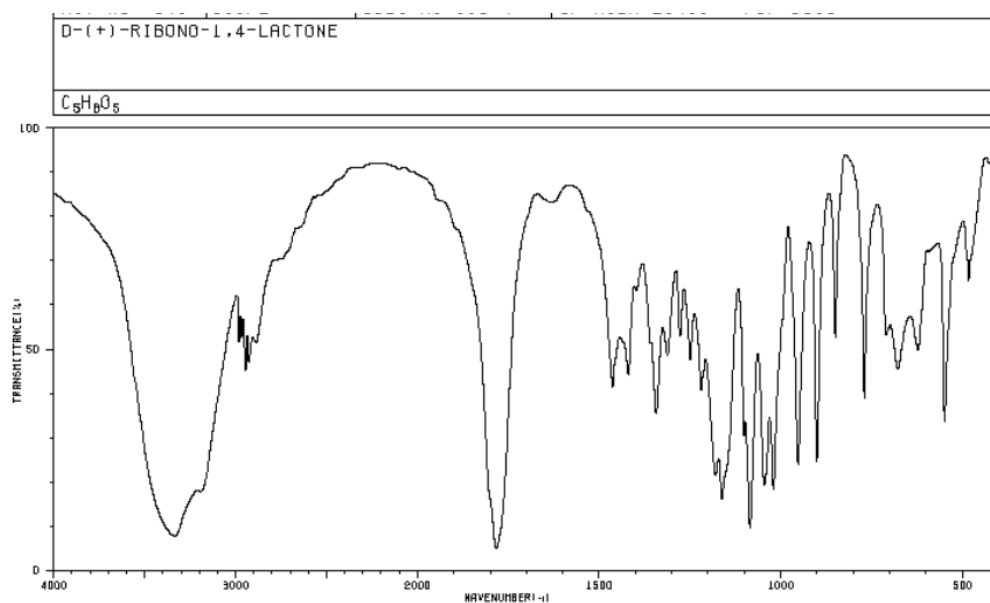


Figura 1: Espectro IR del compuesto 2.¹

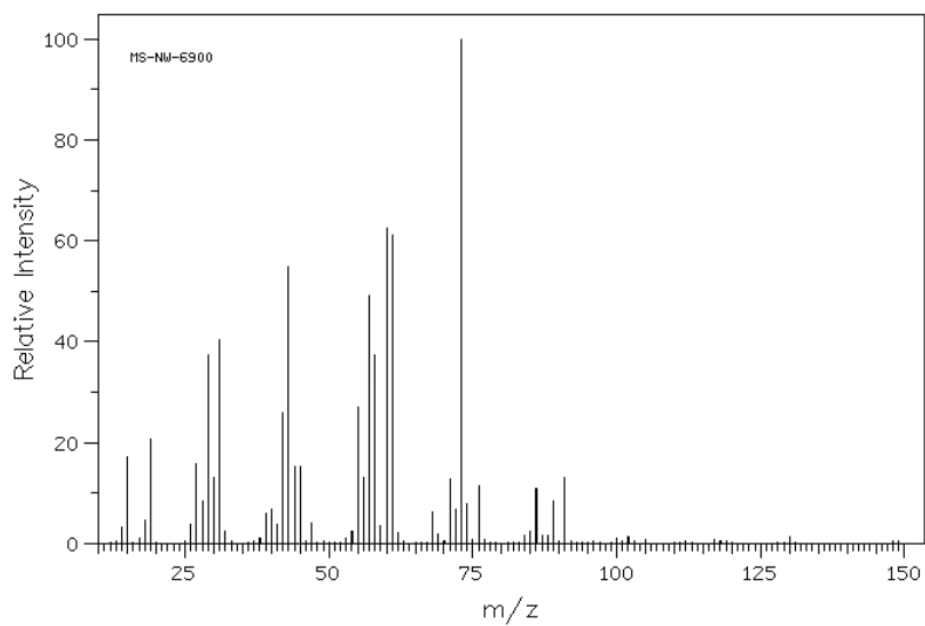


Figura 2: Espectro de Masas del compuesto **2**.²

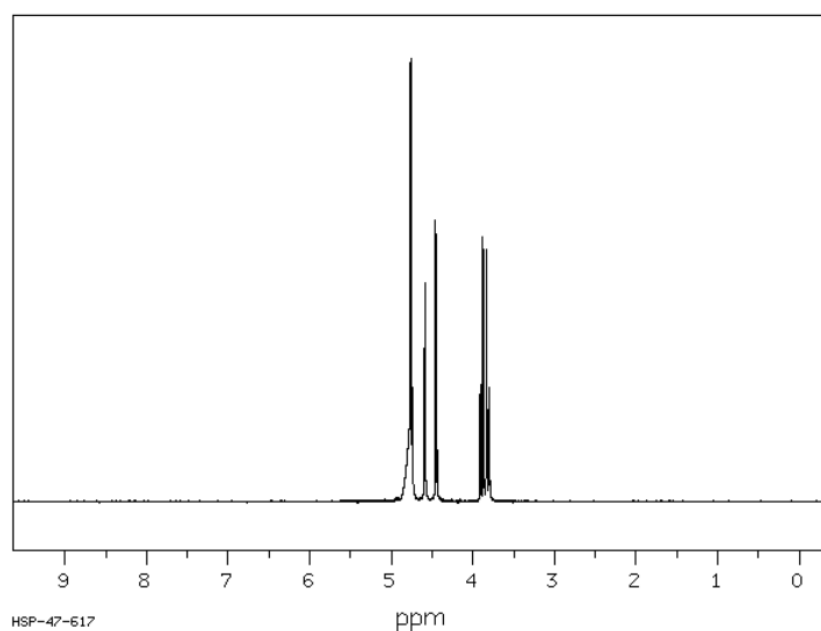


Figura 3: Espectro ^1H -RMN del compuesto **2**.³

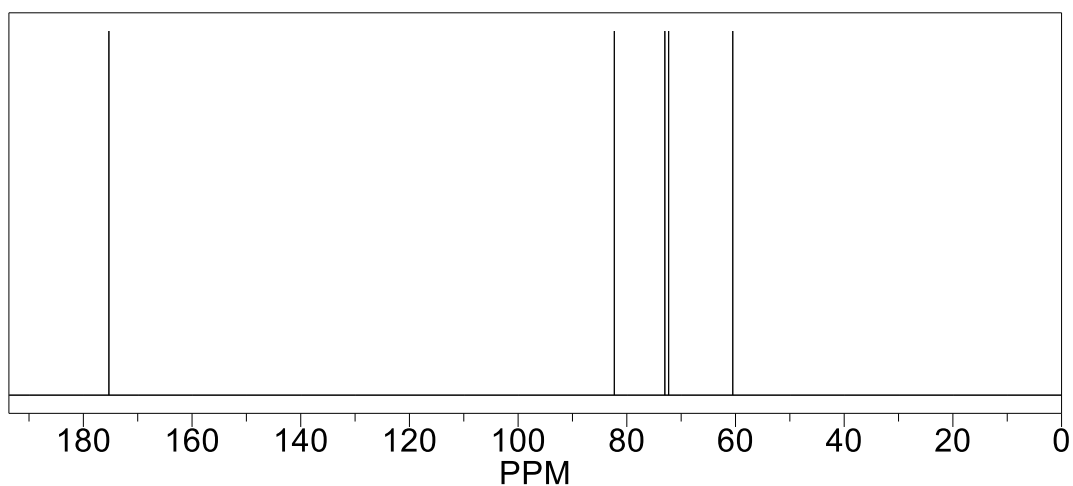
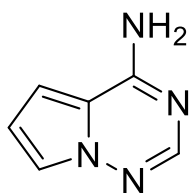


Figura 4: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 2.

- Compuesto 3



pyrrolo[2,1-f][1,2,4]triazin-4-amine

Fórmula molecular: $\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_4$
 Peso molecular: 134.139 g/mol
 Punto de fusión: 236-239°C
 Densidad: 1.509 g/mL
 Composición: C (53.72%), H (4.51%), N (41.77%)
 Refracción molar: $37.07 \pm 0.5 \text{ cm}^3$
 Índice de refracción: 1.773 ± 0.05
 CAS #: 159326-68-8

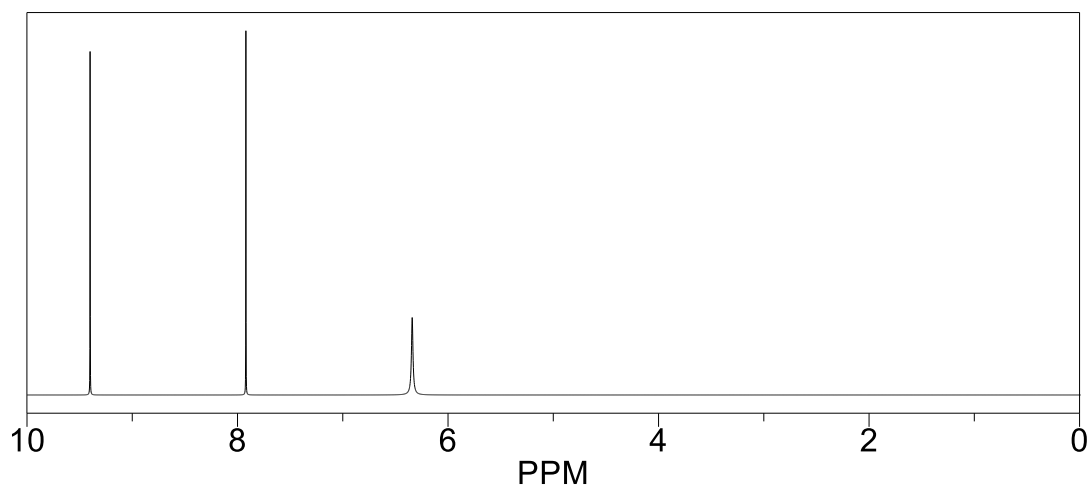


Figura 5: Espectro ^1H -RMN del compuesto 3.

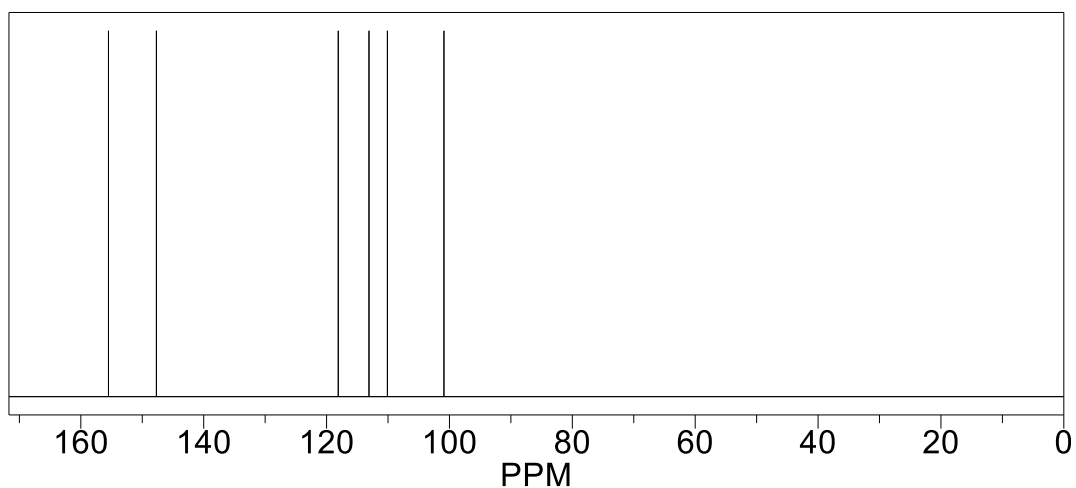
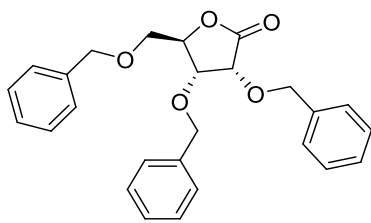


Figura 6: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 3.

- Compuesto 4



(3R,4R,5R)-3,4-bis(benzyloxy)-5-((benzyloxy)methyl)dihydrofuran-2(3H)-one

Fórmula molecular: $\text{C}_{26}\text{H}_{26}\text{O}_5$
 Peso molecular: 418.48164 g/mol
 Densidad: 1.21 ± 0.1 g/mL
 Composición: C (74.62%), H (6.26%),
 O (19.12%)
 Refracción molar: 118.19 ± 0.4 cm³
 Índice de refracción: 1.602 ± 0.03

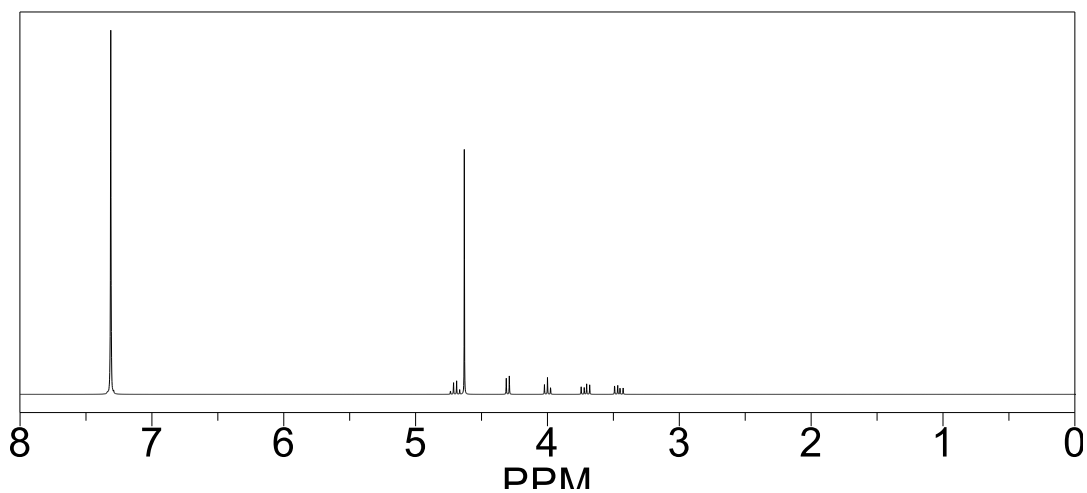


Figura 7: Espectro ^1H -RMN del compuesto 4.

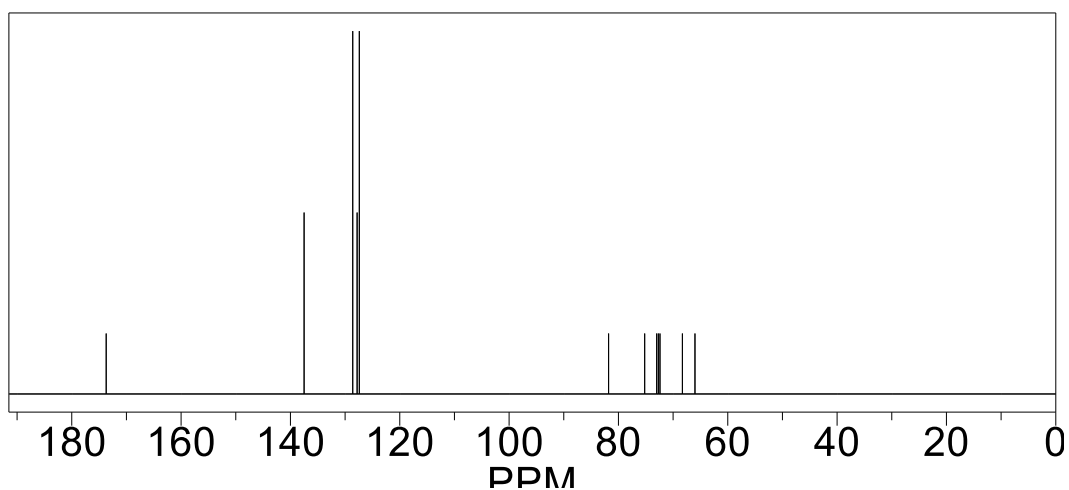
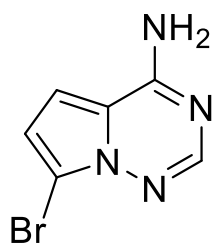


Figura 8: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 4.

- Compuesto 5



Fórmula molecular: $\text{C}_6\text{H}_5\text{BrN}_4$
 Peso molecular: 213.0347 g/mol
 Densidad: 2.09 ± 0.1 g/mL
 Composición: C (33.83%), H (2.37%),
 Br (37.51%), N (26.30%)
 Refracción molar: 44.62 ± 0.5 cm³
 Índice de refracción: 1.830 ± 0.05

7-bromopyrrolo[2,1-*f*][1,2,4]triazin-4-amine

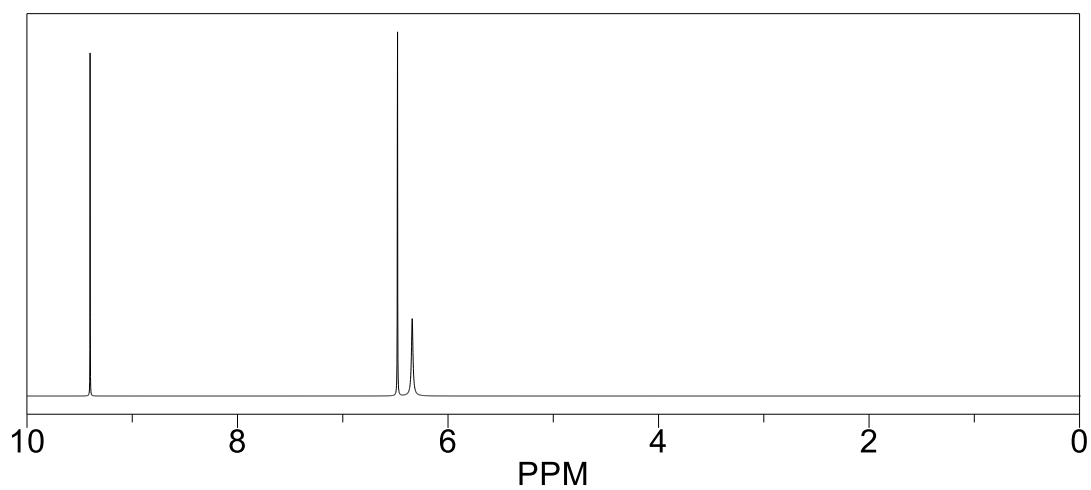


Figura 9: Espectro ^1H -RMN del compuesto 5.

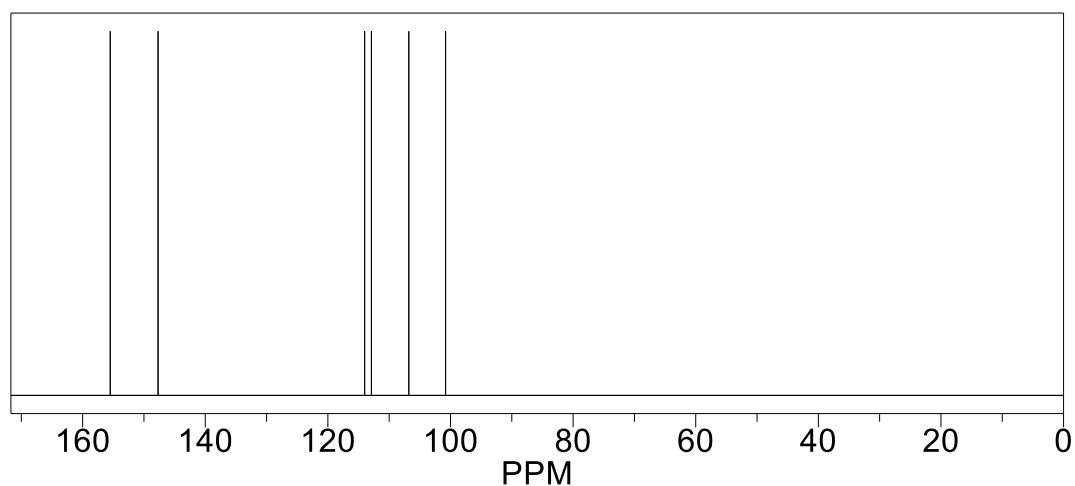
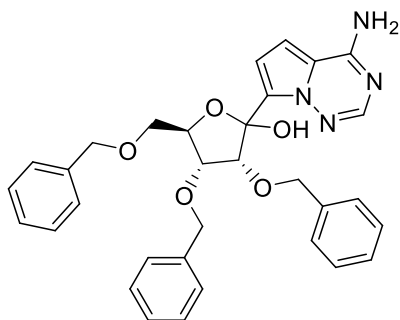


Figura 10: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 5.

- Compuesto 6



Fórmula molecular: $\text{C}_{32}\text{H}_{32}\text{N}_4\text{O}_5$
 Peso molecular: 552.62028 g/mol
 Densidad: 1.31 ± 0.1 g/mL
 Composición: C (69.55%), H (5.84%), N (10.14%), O (14.48%)
 Refracción molar: 153.65 ± 0.5 cm³
 Índice de refracción: 1.649 ± 0.05

(3*R*,4*R*,5*R*)-2-(4-aminopyrrolo[2,1-*f*][1,2,4]triazin-7-yl)-3,4-bis(benzyloxy)-5-((benzyloxy)methyl)tetrahydrofuran-2-ol

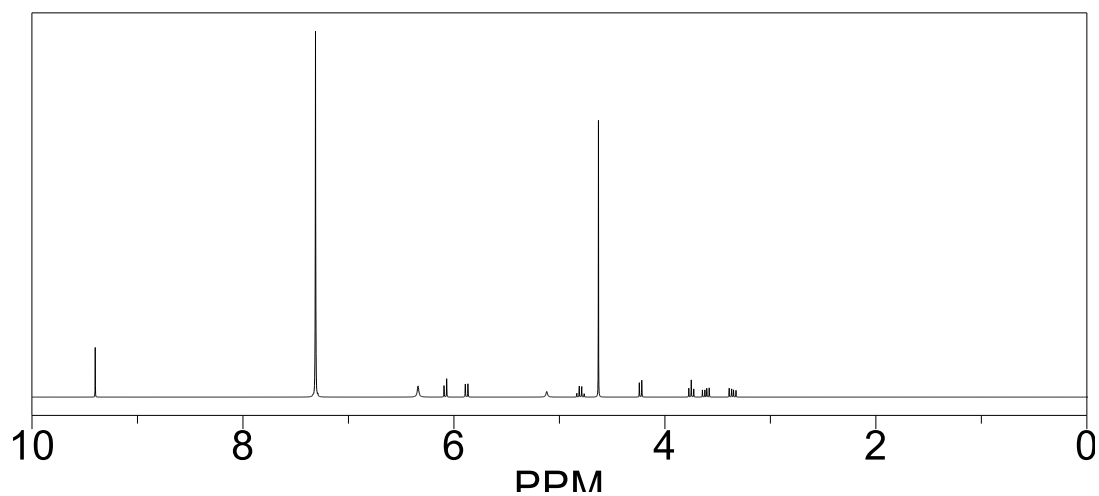


Figura 11: Espectro ^1H -RMN del compuesto 6.

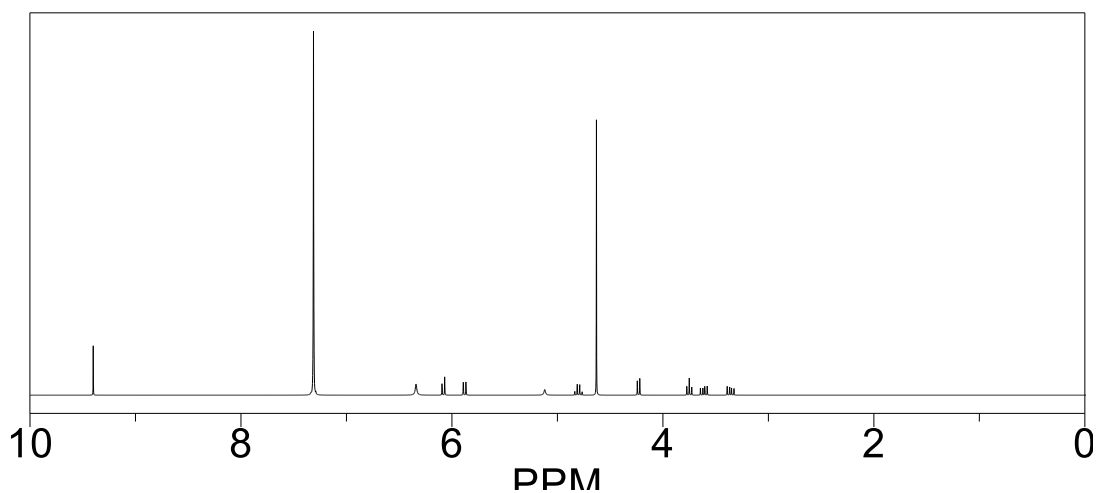
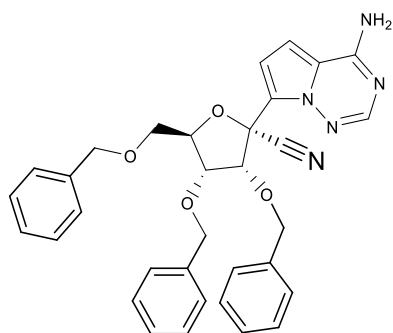


Figura 12: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 6.

- Compuesto 7



Fórmula molecular: $\text{C}_{33}\text{H}_{31}\text{N}_5\text{O}_4$
 Peso molecular: 552.62028 g/mol
 Densidad: 1.28 ± 0.1 g/mL
 Composición: C (70.57%), H (5.56%), N (12.47%), O (11.39%)
 Refracción molar: 159.32 ± 0.5 cm³
 Índice de refracción: 1.649 ± 0.05

(2*R*,3*R*,4*R*,5*R*)-2-(4-aminopyrrolo[2,1-*f*][1,2,4]triazin-7-yl)-3,4-bis(benzyloxy)-5-((benzyloxy)methyl)tetrahydrofuran-2-carbonitrile

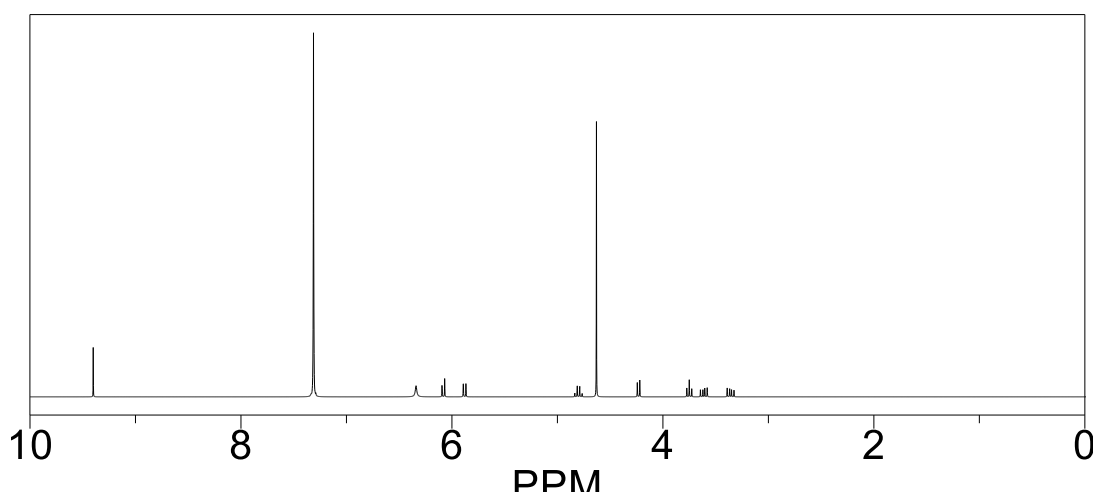


Figura 13: Espectro ^1H -RMN del compuesto 7.

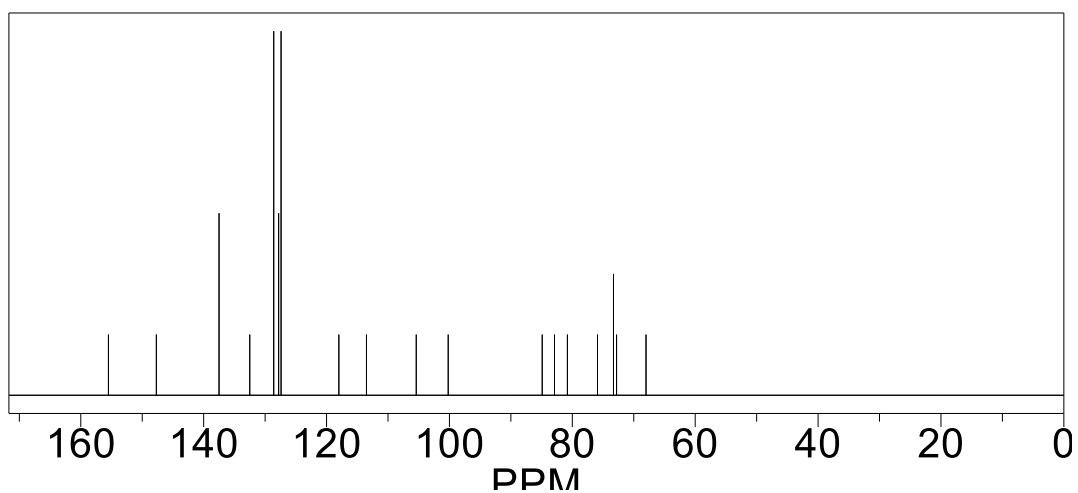
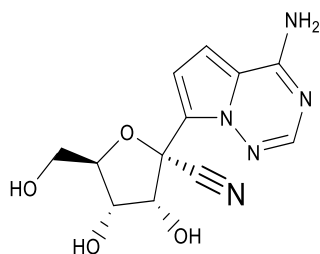


Figura 14: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 7.

- Compuesto 8



Fórmula molecular: $\text{C}_{12}\text{H}_{13}\text{N}_5\text{O}_4$
 Peso molecular: 291.26272 g/mol
 Densidad: 1.84 ± 0.1 g/mL
 Composición: C (49.48%), H (4.50%),
 N (24.04%), O (21.97%)
 Refracción molar: 68.57 ± 0.5 cm³
 Índice de refracción: 1.818 ± 0.05

(2R,3R,4S,5R)-2-(4-aminopyrrolo[2,1-f][1,2,4]triazin-7-yl)-
 3,4-dihydroxy-5-(hydroxymethyl)tetrahydrofuran-2-
 carbonitrile

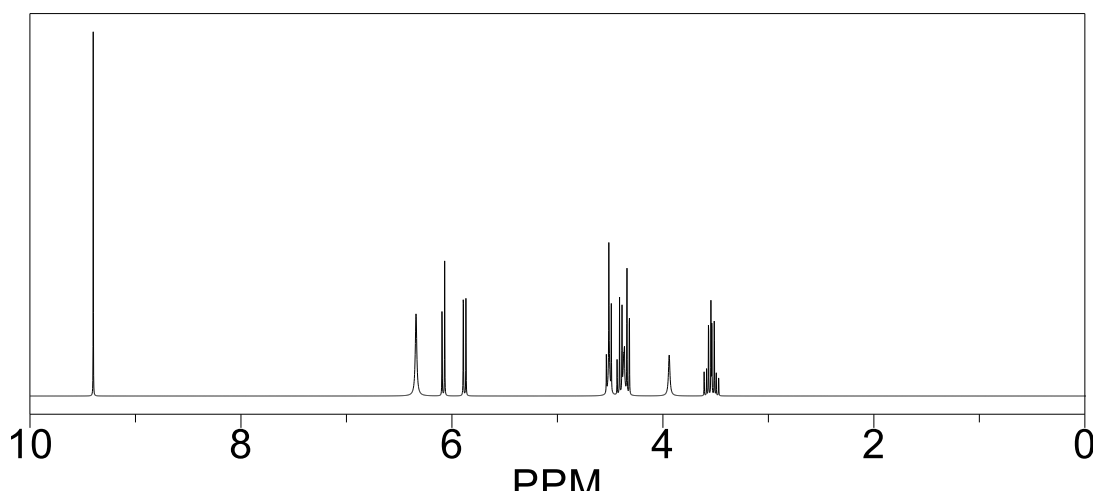


Figura 15: Espectro ^1H -RMN del compuesto 8.

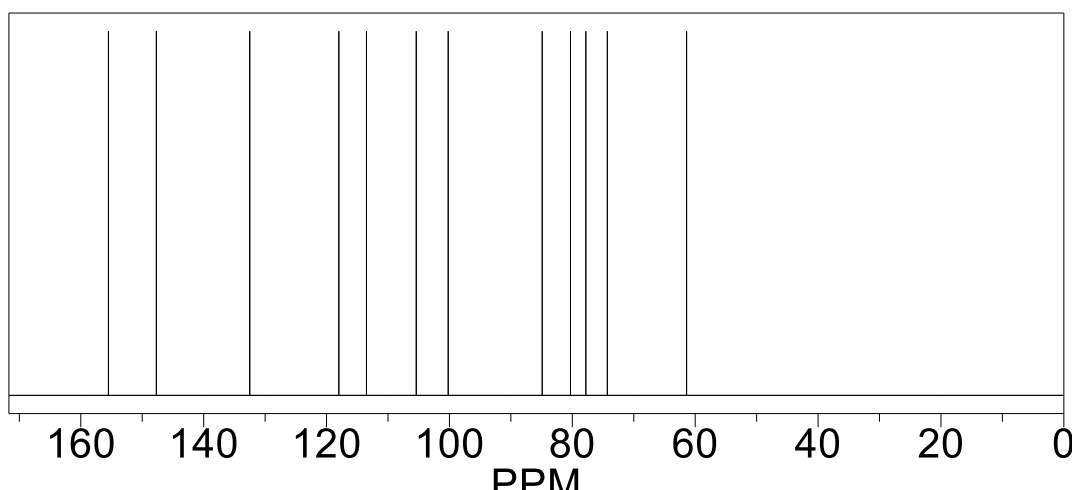
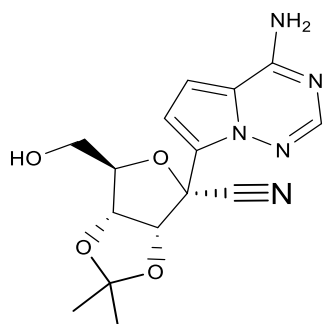


Figura 16: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 8.

- **Compuesto 9**



(3aR,4R,6R,6aR)-4-(4-aminopyrrolo[2,1-f][1,2,4]triazin-7-yl)-6-(hydroxymethyl)-2,2-dimethyltetrahydrofuro[3,4-d][1,3]dioxole-4-carbonitrile

Fórmula molecular: $\text{C}_{15}\text{H}_{17}\text{N}_5\text{O}_4$
 Peso molecular: 331.32658 g/mol
 Densidad: 1.66 ± 0.1 g/mL
 Composición: C (54.38%), H (5.17%), N (21.14%), O (19.32%)
 Refracción molar: 81.08 ± 0.5 cm³
 Índice de refracción: 1.747 ± 0.05

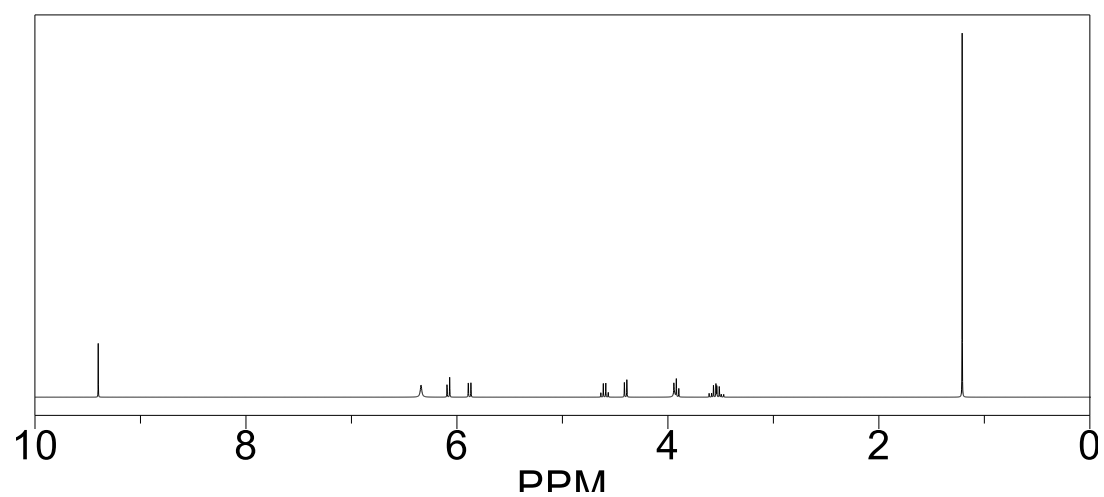


Figura 17: Espectro ^1H -RMN del compuesto 9.

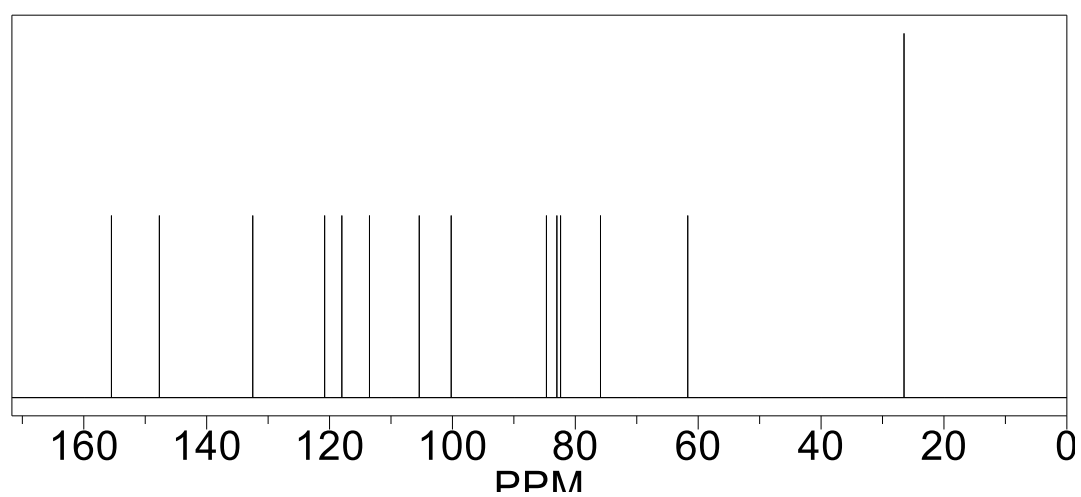
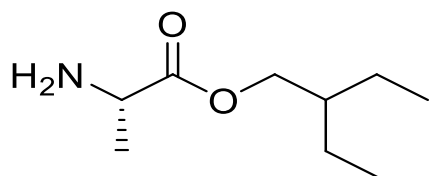


Figura 18: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 9.

- Compuesto **10**



2-ethylbutyl *L*-alaninate

Fórmula molecular: $C_9H_{19}NO_2$
 Peso molecular: 173.25266 g/mol
 Densidad: 0.936 ± 0.06 g/mL
 Composición: C (62.39%), H (11.05%), N (8.08%),
 O (18.47%)
 Refracción molar: 81.08 ± 0.5 cm³
 Índice de refracción: 1.747 ± 0.05

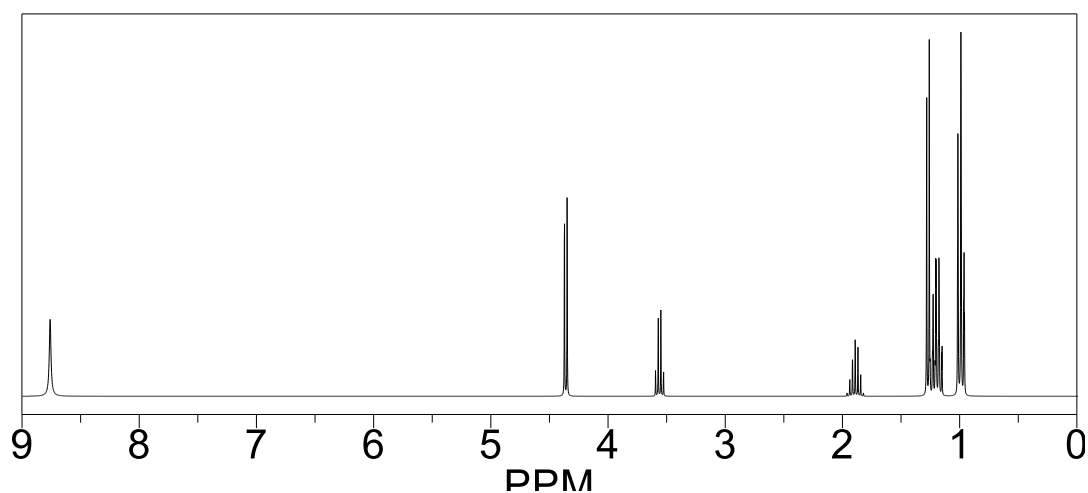


Figura 19: Espectro 1H -RMN del compuesto **10**.

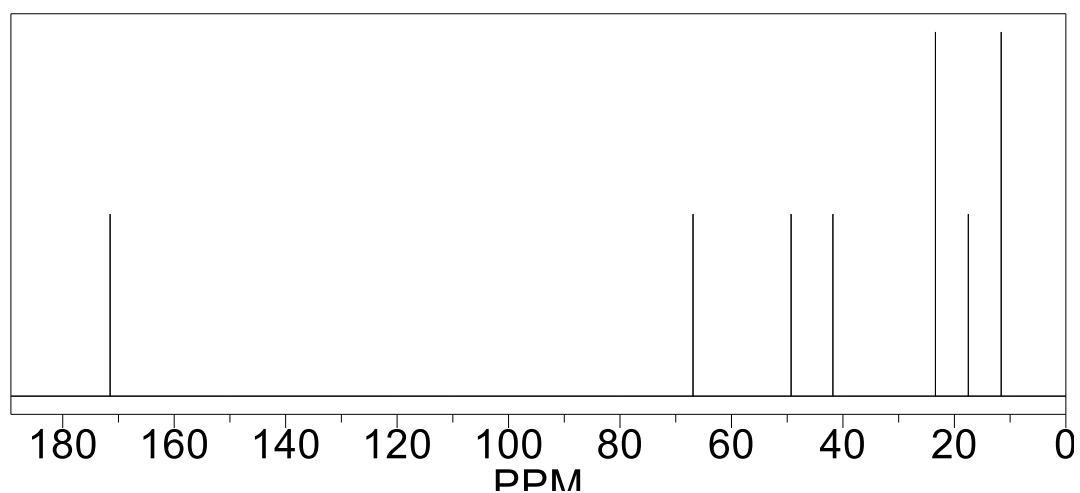
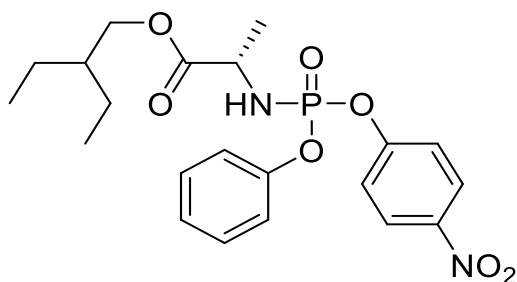


Figura 20: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto **10**.

- **Compuesto 11**



Fórmula molecular: $C_{21}H_{27}N_2O_7P$
 Peso molecular: 450.422042 g/mol
 Densidad: 1.241 ± 0.06 g/mL
 Composición: C (56.00%), H (6.04%), N (6.22%),
 O (24.86%), P (6.88%)
 Refracción molar: 114.95 ± 0.3 cm³
 Índice de refracción: 1.546 ± 0.02

2-ethylbutyl ((4-nitrophenoxy)(phenoxy)phosphoryl)-L-alaninate

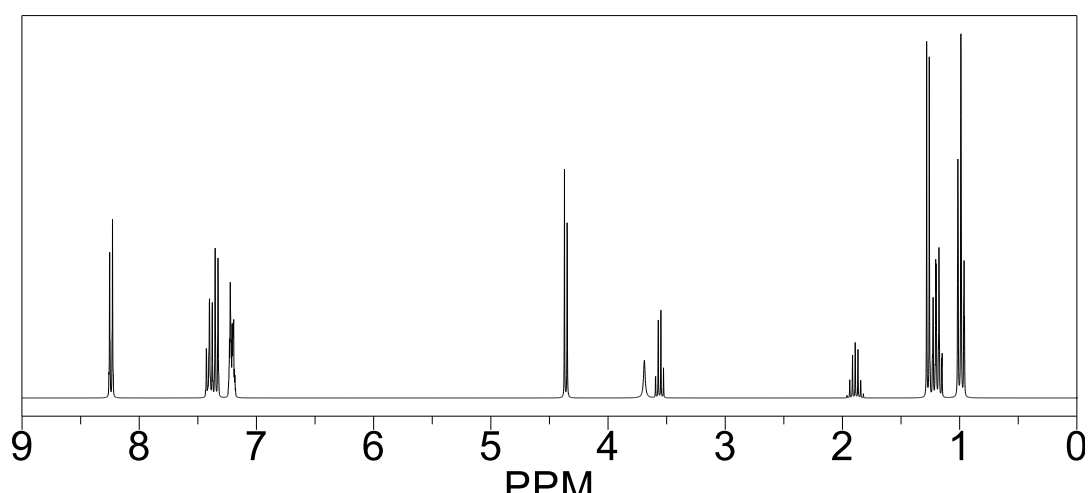


Figura 21: Espectro 1H -RMN del compuesto 11.

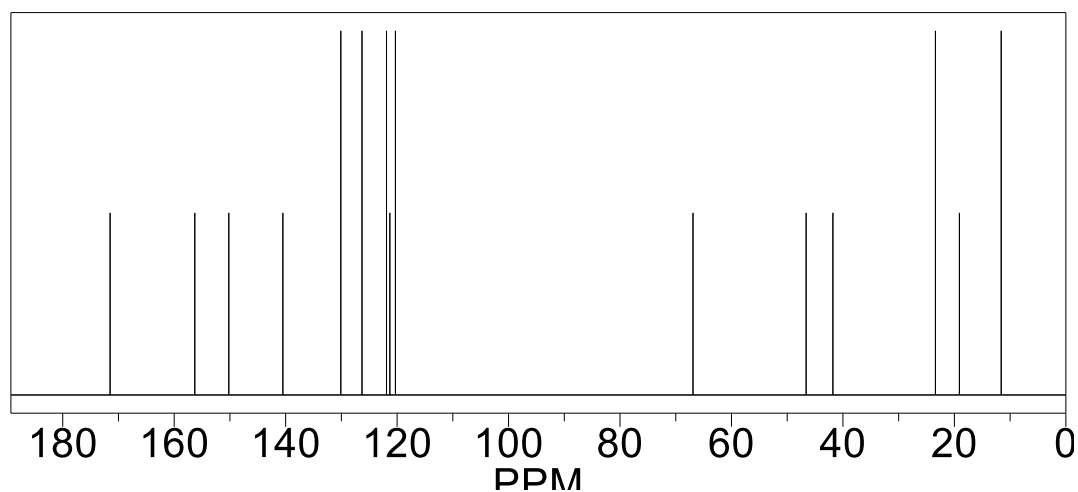
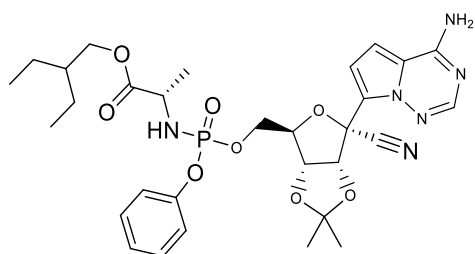


Figura 22: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 11.

- **Compuesto 12**



Fórmula molecular: $C_{30}H_{39}N_6O_8P$
 Peso molecular: 642.639822 g/mol
 Densidad: 1.42 ± 0.1 g/mL
 Composición: C (56.07%), H (6.12%),
 N (13.08%), O (19.92%), P (4.82%)
 Refracción molar: 162.04 ± 0.5 cm³
 Índice de refracción: 1.638 ± 0.05

2-ethylbutyl (((3aR,4R,6R,6aR)-6-(4-aminopyrrolo[2,1-f][1,2,4]triazin-7-yl)-6-cyano-2,2-dimethyltetrahydrofuro[3,4-d][1,3]dioxol-4-yl)methoxy)(phenoxy)phosphoryl)-L-alaninate

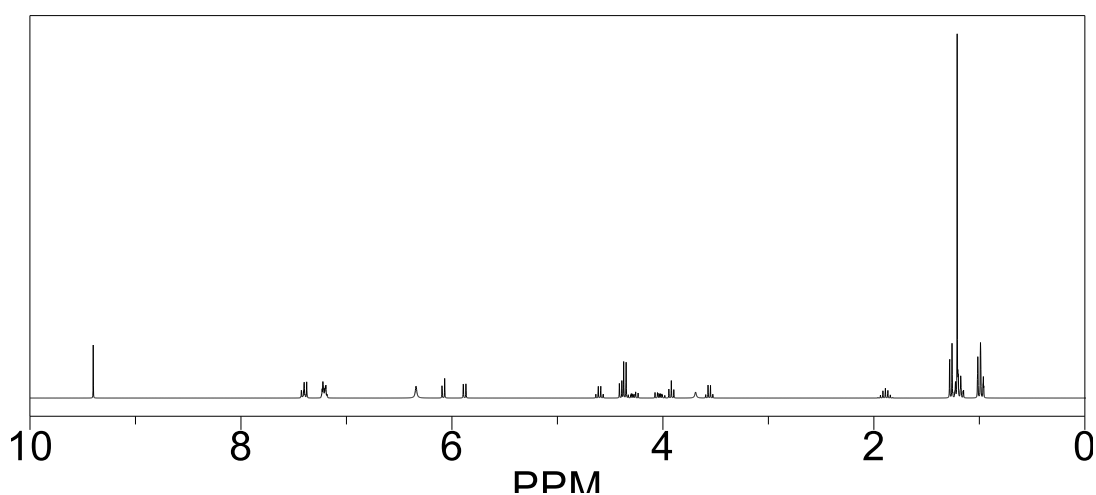


Figura 23: Espectro 1H -RMN del compuesto 12.

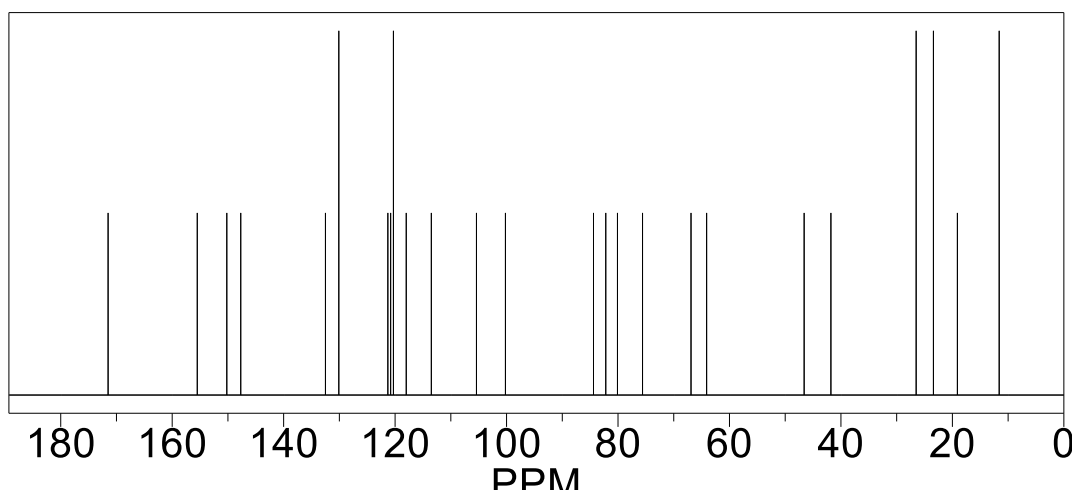
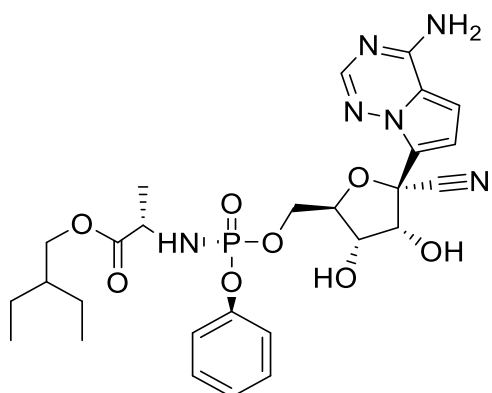


Figura 24: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 12.

- **Compuesto 1**



Fórmula molecular: $C_{27}H_{35}N_6O_8P$
 Peso molecular: 602.575962 g/mol
 Densidad: 1.47 ± 0.1 g/mL
 Composición: C (53.82%), H (5.85%), N (13.95%), O (21.24%), P (5.14%)
 Refracción molar: 149.53 ± 0.5 cm³
 Índice de refracción: 1.651 ± 0.05

2-ethylbutyl ((S)-(((2R,3S,4R,5R)-5-(4-aminopyrrolo[2,1-f][1,2,4]triazin-7-yl)-5-cyano-3,4-dihydroxytetrahydrofuran-2-yl)methoxy)(phenoxy)phosphoryl)-L-alaninate

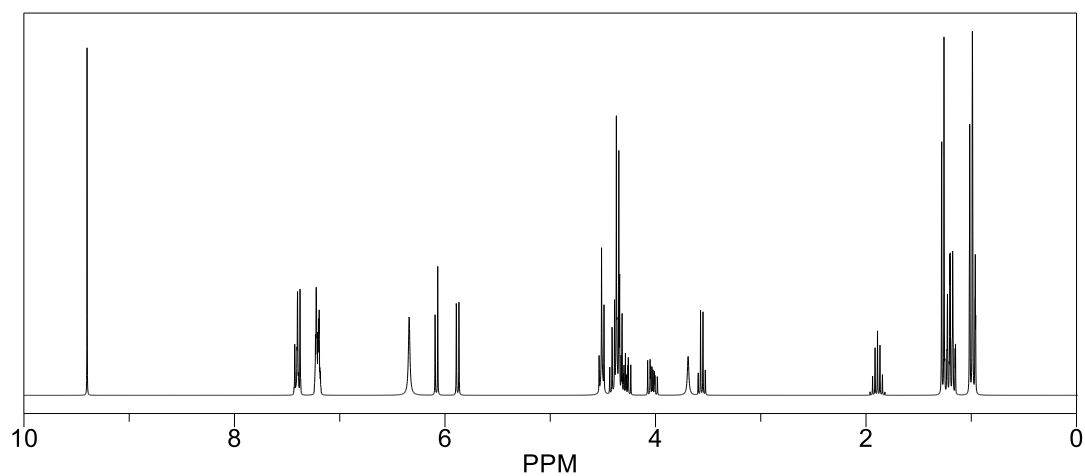


Figura 25: Espectro 1H -RMN del compuesto 1.

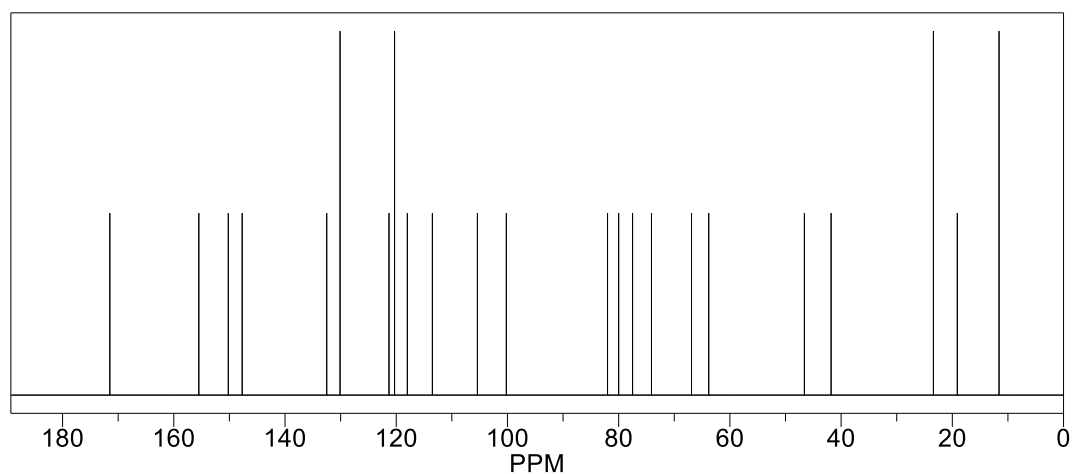


Figura 26: Espectro ^{13}C -RMN del compuesto 1.

Referencias

1. AIST: Spectral Database for Organic Compounds, SDBS. https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgibin/cre_frame_disp.cgi?spectrum_type=ir&sdbno=15674&fname=NIDA23450 (accessed Aug 30, 2020).
2. AIST: Spectral Database for Organic Compounds, SDBS. https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgibin/cre_frame_disp.cgi?spectrum_type=ms&sdbno=15674&fname=MSNW6900 (accessed Aug 30, 2020).
3. AIST: Spectral Database for Organic Compounds, SDBS. https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgibin/cre_frame_disp.cgi?spectrum_type=hnmr&sdbno=15674&fname=HSP47617 (accessed Aug 30, 2020).