

XXIII SINAQO

LIBRO DE RESUMENES



*Simposio Nacional de
Química Orgánica
Córdoba, 2021*



**SOCIEDAD ARGENTINA DE INVESTIGACIÓN
EN QUÍMICA ORGÁNICA**



XXIII SIMPOSIO NACIONAL DE QUÍMICA

Libro de Resúmenes del XXIII Simposio Nacional de Química Orgánica

Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica

Córdoba, Argentina, Noviembre de 2021

Diseño, compilación, diagramación, compaginación y edición: Silvia Soria Castro, Natalia Pacioni, Juan Pablo Colomer y Liliana B. Jimenez.

Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica-SAIQO
XXIII Simposio Nacional de Química Orgánica / compilación - 1a ed. - Córdoba, 2021.
Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online
ISBN 978-987-88-2352-2

1. Química Orgánica. I. Colomer, Juan Pablo, comp. II. Título.
CDD 547.001

ISBN 978-987-88-2352-2



COMISIÓN DIRECTIVA SAIQO 2019-2021

<i>Presidente:</i>	Dra. Marcela Kurina-Sanz
<i>Vice-Presidente:</i>	Dra. Miriam Strumia
<i>Presidente Saliente:</i>	Dr. Gabriel Radivoy
<i>Secretario:</i>	Dr. Guillermo Reta
<i>Pro-Secretario:</i>	Dr. Alejandro Orden
<i>Tesorera:</i>	Dra. Cynthia Magallanes
<i>Vocales Titulares:</i>	Dra. Celeste Aguirre Pranzoni
	Dra. Rosalía Agustí
	Dra. Viviana Nicotra
<i>Vocales Suplentes:</i>	Dra. Daniela Gamenara
	Dra. Andrea Bracca
<i>Revisores de Cuentas:</i>	Dr. Gerardo Burton
	Dr. Juan C. Oberti

COMISIÓN ORGANIZADORA XXIII SINAQO

<i>Presidente:</i>	Dra. Miriam Strumia
<i>Secretario (Córdoba):</i>	Dr. Juan E. Argüello
<i>Secretario (San Luis):</i>	Dr. Guillermo Reta
<i>Pro-Secretarios:</i>	Dr. Alejandro Fracaroli Dr. Fabricio Bisogno
<i>Tesorera:</i>	Dra. María E. Budén
<i>Pro-Tesorera:</i>	Dra. Manuela García
<i>Vocales:</i>	Dr. Adrián Heredia Dr. Fernando Silva Dra. Gabriela Oksdath-Mansilla Dr. Javier Bardagí Dr. Jorge Uranga Dr. Juan Pablo Colomer Dra. Lydia Bouchet Dra. Liliana Jimenez Dr. Marcelo Puiatti Dra. Natalia Pacioni Dra. Natividad Herrera-Cano Dra. Paula Uberman Dra. Silvia Barolo Dra. Silvia Soria-Castro Dr. Tomás Tempesti

COMITÉ CIENTÍFICO XXIII SINAQO

Área Productos Naturales y Bioorgánica:

Dr. Carlos Pungitore (Universidad Nacional de San Luis)

Dr. Guillermo Labadié (Universidad Nacional de Rosario)

Dra. Elizabeth Lewkowicz (Universidad Nacional de Quilmes)

Dra. Alicia Couto (Universidad de Buenos Aires-FCEN)

Área Fisicoquímica Orgánica:

Dr. Alberto Postigo (Universidad de Buenos Aires-FFyB)

Dr. Sergio Bonesi (Universidad de Buenos Aires-FCEN)

Dr. Darío Falcone (Universidad Nacional de Río Cuarto)

Dra. Mariana Fernández (Universidad Nacional de Córdoba)

Área Síntesis Orgánica:

Dr. Javier Ramírez (Universidad de Buenos Aires-FCEN)

Dr. David González (Universidad de la República)

Dr. Alejandro Fracaroli (Universidad Nacional de Córdoba)

Dr. Ariel Sarotti (Universidad Nacional de Rosario)

Dr. Darío Gerbino (Universidad Nacional de Sur)

Dr. Pedro Colinas (Universidad Nacional de La Plata)

AUSPICIOS



Comisión organizadora agradece la participación de los siguientes patrocinadores:

PATROCINADORES DIAMANTE



PATROCINADORES



AGRADECIMIENTOS

- Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (CONICET)
- Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT)
- Facultad de Ciencias Químicas - UNC
- Universidad Nacional de Córdoba
- Secretaría de Ciencia y Tecnología de la UNC
- Academia Nacional de Ciencias
- Ministerio de Ciencia y Tecnología. Gobierno de la Provincia de Córdoba
- Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba (INFIQC-CONICET)
- Bruker Scientific Instruments
- Perkin Elmer
- CAS. American Chemical Society
- The Journal of Organic Chemistry y Organic Letters
- D'Amico Sistemas S. A.
- Juan Blangino S. A. Fábrica de Mosaicos
- Velez. Epifanio Jimenez e Hijos S. A.
- Oliveira
- Porta

INDICE GENERAL DE CONTENIDOS

	Página
Programa XXIII SINAQO	1
Conferencias Plenarias	6
Conferencias Invitadas	14
Presentaciones Orales	31
Pósters	
<i>Fisicoquímica Orgánica</i>	33
<i>Productos Naturales y Bioorgánica</i>	146
<i>Síntesis Orgánica</i>	225
Palabras claves	350

XXIII SINAQO Programa Extendido

Lunes 15 de Noviembre de 2021: Bloque REACTIVIDAD Y QUÍMICA SUSTENTABLE

8:45 h	BIENVENIDA AL XXIII SINAQO
9:00-9:45 h	CP 1- Wolfgang Kroutil Universidad de Graz, Austria. "Biocatalysis as an Alternative TOOL for (Asymmetric) Organic Synthesis"
9:45-10:15 h	CI 1- Vincent Ferrières Universidad Rennes, Francia. "Algaims... synthesis and analysis of furanosidic carbohydrates"
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
10:30-11:00 h	CI 2- Mónica Nardi Università Magna Graecia di Catanzaro, Italia. "Green processes in the synthesis of pharmaceutical intermediates and products"
11:00-11:30 h	CI 3- Ernesto De Jesús Universidad de Alcalá, España. "Explorando la reactividad de complejos radicalarios de Paladio(I)"
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
14:00-14:45 h	CP 2- Nancy Levinger Universidad de Colorado State, Estados Unidos. "Osmolytes in heterogeneous systems – how water and osmolytes combine for low temperature protection"
14:45-15:15 h	CI 4- Nediljko Budisa Universidad de Manitoba, Canadá. "Recent advances in genetic code engineering in <i>Escherichia coli</i> "
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
15:30-16:45 h	PRESENTACIONES ORALES PO1: 15:30-15:45 h. Iván Cortés (póster SO-6) IQUIR-UNR. "Síntesis total de cromanona a y compuestos relacionados. Evaluación de su actividad antifúngica contra <i>Candida albicans</i> , un agente formador de biofilms" PO2: 15:45-16:00 h. Jimena E. Díaz (póster FQO-4) CONICET-UBA. "3-aril-4(3H)-iminoquinazolinas atropisoméricas: evidencia espectroscópica y estudio teórico de las barreras de enantiomerización" PO3: 16:00-16:15 h. M. Luz Tibaldi Bollati (póster PNB-5) IMBIV-UNC. "Análisis de la diversidad estructural generada en la síntesis de compuestos bioactivos a partir de productos naturales" PO4: 16:15-16:30 h. Macarena Eugui (póster SO-8) UdeLaR. "Síntesis orientada a la diversidad de símiles de compuestos naturales basados en tropolonas y su

	<p>evaluación como antitumorales”</p> <p>PO5: 16:30-16:45 h. Leandro G. Gutierrez (póster FQO-9) IQAL-UNL. “Desarrollo de una membrana polimérica sensora de Ni²⁺ en muestras de agua”</p>
INTERVALO	
17:00-18:30 h	<p>Galería virtual de resultados 1 (Pósters SO-1 al SO-41; FQO-1 al FQO-37 y PNB-1 al PNB-26)</p>

Martes 16 de Noviembre de 2021: Bloque BIOACTIVIDAD

9:00-9:45 h	<p>CP 3- Paul Hergenrother Universidad de Illinois, Estados Unidos. “The Synthesis of Complex and Diverse Compounds Leads to Novel Antibiotics for Gram-Negative Bacteria”</p>
9:45-10:15 h	<p>CI 5- Ana Paula Murray Universidad Nacional del Sur, Argentina. “Nuevas moléculas híbridas inspiradas en productos naturales con potencial aplicación como agentes multitarget en la terapia de Alzheimer”</p>
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
10:30-11:00 h	<p>CI 6- Ignacio Carrera Garesse Universidad de La República, Uruguay. “Alcaloides de la iboga: Preparación y estudio de su potencial antiadictivo y antidepresivo”</p>
11:00-11:30 h	<p>CI 7- Francisco Macías Universidad de Cádiz, España. “Application of organic nanoencapsulation in biological studies. Tools to enhance bio-properties”</p>
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
14:00-14:45 h	<p>CP 4- Martha Ribeiro Instituto de Investigaciones Nucleares y Energéticas, San Pablo, Brasil. “Antimicrobial photodynamic therapy: basis, applications, and future perspectives”</p>
14:45-15:15 h	<p>CI 8- Premio Gros Fabrizio Bisogno Universidad Nacional de Córdoba, Argentina. “Entre reacciones multicomponente y cascadas enzimáticas: algunas aproximaciones biocatalíticas en síntesis asimétrica”</p>
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
15:30-16:45 h	<p><u>Mesa Redonda: “Química Orgánica en la Industria Actual”</u> Silvina Quintana Lazópulos (BASF) Iván Cabanillas (JLA) Candelaria Llorens (OncoPrecisión)</p>

	Guillermo Lotz (Laboratorios Proyar)
INTERVALO	
17:00-18:30 h	Galería virtual de resultados 2 (Pósters SO-42 al SO-82; FQO-38 al FQO-74 y PNB-27 al PNB-52)
19:00-20:00 h	Evento Social

Miércoles 17 de Noviembre de 2021: Bloque MATERIALES Y APLICACIONES

9:00-9:45 h	CP 5- Miroslav Soral Universidad de Palacky, República Checa. "Solid-phase synthesis in the search for biologically active compounds"
9:45-10:15 h	CI 9- Kyungmin Choi Universidad de Sookmyung Women's, Corea del Sur. "Design of Metal-Organic Frameworks and polyhedral for Photocatalytic CO ₂ conversion"
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
10:30-11:00 h	CI 10- Marcelo Dómine Universidad Politécnica de Valencia, España. "Procesos catalíticos para la transformación de materias primas renovables en combustibles y productos químicos"
11:00-11:30 h	CI 11- M. Alejandra Molina Universidad Nacional de Río Cuarto, Argentina. "Desarrollo de hidrogeles poliméricos termosensibles compuestos"
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
14:00-14:45 h	CP 6- Lyle Isaacs Universidad de Maryland, Estados Unidos. "Cucurbit[n]uril Molecular Containers: From Basic Science to Biomedical Applications"
14:45-15:15 h	CI 12- Rolando Spanevello Universidad Nacional de Rosario, Argentina. "Plataformas químicas alternativas para el desarrollo de nuevos materiales"
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
15:30-16:45 h	PRESENTACIONES ORALES PO6: 15:30-15:45 h. Lucas Dada (póster SO-10) CIHIDECAR-UBA. "Bencil tiodisacáridos: síntesis y estudios de inhibición de la β -galactosidasa de <i>E. coli</i> " PO7: 15:45-16:00 h. Tonino Adessi (póster FQO-7) IMBIV-UNC. "Búsqueda de blancos moleculares de lactonas sesquiterpénicas tripanocidas mediante docking reverso" PO8: 16:00-16:15 h. Paola Rodriguez (póster PNB-4) UdeLaR. "Efecto tipo-

	<p>antidepresivo inducido por el alcaloide psicodélico ibogaína y su metabolito noribogaína en ratas: relevancia para su efecto antiadictivo"</p> <p>PO9: 16:15-16:30 h. M. Alexia El Ain (póster SO-5) INFIQC-UNC. "Síntesis de bicarbazoles fotoluminiscentes utilizando luz visible"</p> <p>PO10: 16:30-16:45 h. Agostina Riccardo (póster FQO-6) UNSL. "Compuestos fotosensibles de origen vegetal vehiculizados en nanotransportadores"</p>
INTERVALO	
17:00-18:30 h	<p>Galería virtual de resultados 3 (Pósters SO-83 al SO-124; FQO-75 al FQO-112 y PNB-53 al PNB-78)</p>

Jueves 18 de Noviembre de 2021: Bloque CATÁLISIS Y PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS

9:00-9:45 h	<p>CP 7- Jason Harper Universidad de New South Wales, Australia. "Acidity of carbon acids, electronics and nucleophilicity: A mix of measurements to understand catalysis"</p>
9:45-10:15 h	<p>CI 13- Fernando García-Tellado Universidad de La Laguna, España. "2-Aminopirroles e índoles: un nuevo acceso a estos heterociclos mediante síntesis domino"</p>
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
10:30-11:15 h	<p>CP 8- Géraldine Masson Universidad de París-Saclay, Francia. "Asymmetric difunctionalization of enamides via hydrogen bond catalysis"</p>
11:15-11:45 h	<p>CI 14- Diego Andrada Universidad Saarland, Alemania. "Group 13/15 Chemistry: a playground for chemical bonding"</p>
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
14:00-14:30 h	<p>CI 15- Elisa Milanesio Universidad Nacional de Río Cuarto, Argentina. "Síntesis y propiedades de ftalocianinas para la inactivación fotodinámica de microorganismos"</p>
14:30-15:00 h	<p>CI 16- Juan Manuel Lázarro-Martínez Universidad de Buenos Aires, Argentina. "Alcances y aplicaciones de la Resonancia Magnética Nuclear al estudio de sólidos orgánicos e inorgánicos"</p>
INTERVALO	Salas de Café 1 y 2
15:15-16:00 h	PRESENTACIONES ORALES

	<p>PO11: 15:15-15:30 h. Ignacio Cabezudo (póster PNB-3) UNR. "Síntesis dirigida por efecto biológico de inhibidores de virulencia en <i>Salmonella</i> mediante bioautografía en TLC"</p> <p>PO12: 15:30-15:45 h. Julieta L. Sacchetto (póster FQO-2) IIDAS-UNRC. "Fotodegradación del fungicida azólico: epoxiconazol, por irradiación UV y solar en diversas matrices acuosas"</p> <p>PO13: 15:45-16:00 h. Flavia C. Zacconi (póster SO-7) PUC, Chile. "Síntesis convergente de derivados de 1,2,3-triazoles 1,4-disustituidos con actividad inhibitoria frente al factor Xa"</p>
16:00-16:45 h	<p><u>Charlas técnicas Sponsors:</u></p> <p>Bruker</p> <p>Perkin Elmer</p>
17:00-18:30 h	Cierre y premiaciones

ANÁLISIS COMPUTACIONAL DE EXTRACTOS NATURALES CON ACTIVIDAD INHIBITORIA EN VENENOS DE SERPIENTES DEL NEA

José Leonardo Gómez Chávez, **Emilio L. Angelina**, Nélida M. Peruchena

FQO-63

Lab. de Estructura Molecular y Propiedades, IQUIBA-NEA, Universidad Nacional del Nordeste, CONICET, FaCENA, Av. Libertad 5470, Corrientes 3400, Argentina. e-mail: emilioluisangelina@hotmail.com

palabras claves: Fosfolipasa A2, Accidente Bothrópico, Plantas Alexitéricas

Los accidentes ofídicos son un grave problema para la salud pública en nuestro país, y en las regiones del NEA y NOA son causados principalmente por especies del género *Bothrops*. Muchos de los efectos sistémicos causados por el veneno de estas serpientes es atribuido a las fosfolipasas A2 (PLA2) lo que las posiciona como un blanco interesante para la búsqueda de nuevos inhibidores que complementen el tratamiento con sueros antiofídicos.^a

Las plantas se han posicionado como un punto de partida interesante en la búsqueda de soluciones a problemáticas asociadas a la salud al ser una fuente de materia prima que cuenta con una gran variedad de metabolitos secundarios con un alto grado de diversidad estructural y que en muchos casos son altamente bioactivos. Bajo esta premisa se han aislado una serie de flavonoides glicosilados (FGs) a partir de extractos de *Nectandra angustifolia* y *Cissampelos pareira* que han presentado actividad inhibitoria del veneno de *Bothrops diporus* (Bd).^{b,c}

En este estudio computacional se modeló por homología la PLA2 de Bd empleando como moldes las PLA2s de *Bothrops jararacuzzu* monomérica (1UMV) y dimerica (1Z76), se determinaron los posibles sitios y modos de unión de la serie de FGs y se analizaron las interacciones intermoleculares PLA2-FGs.

Para predecir el modo de unión de los FGs sobre la PLA2 monomérica (m-PLA2) se realizaron cálculos de docking molecular en el sitio catalítico seguidos de simulaciones de DM para evaluar su estabilidad relativa. El análisis de densidad electrónica (DE) sobre los complejos más estables permitió detectar interacciones claves dejando en evidencia el efecto de la glicosilación del flavonoide en la unión a m-PLA2. Se encontraron 2 posibles modos de unión, sugar-driven (SD) y flavonoid-driven (FD), según si la parte glicón o aglicón es la más importante para el anclaje del ligando, respectivamente.

Posteriormente, el docking ciego sobre toda la superficie del dímero (d-PLA2) reveló un nuevo sitio de unión en la interfaz entre ambos monómeros.^d Los FGs presentaron uniones estables en este nuevo sitio y las dinámicas de los complejos arrojan resultados prometedores.

Los resultados obtenidos resaltan la importancia de los productos naturales en el desarrollo de tratamientos complementarios ante los accidente ofídicos y abren un escenario interesante para seguir explorando el efecto alexitérico de los FGs sobre las PLA2 bothrópicas.

Referencias:

- a- Meier, J. & White, J. (Eds). CRC Handbook of Clinical Toxicology of Animal Venoms and Poisons. (CRC Press Inc, 1995).
- b- Ricciardi Verrastro, B.; Torres, A.; Ricciardi, G.; Teibler, P.; Maruñak, S.; Barnaba, C.; Larcher, R.; Nicolini, G.; Dellacassa, E.J. *Ethnopharmacol.* **2018**, 212, 36-42.
- c- Ferrini, L.; Rodriguez, J.; Melana Colavita, J.; Olea, G.; Ojeda, G.; Ricciardi, G.; Torres, A.; Aguirre, M. *J. Ethnopharmacol.* **2021**, 272, Art. 113937.
- d- Kumar, R.; Caruso, I.; Ullah, A.; Cornélio, M.; Fossey, M.; de Souza, F.; Arni, R. *Eur. J. Exp. Biol.* **2017**, 7, 1-9.