



XXXII
CAFOI

VIRTUAL

**Congreso Argentino de Fisicoquímica y
Química Inorgánica - La Plata 2021**



XXI CONGRESO ARGENTINO DE FÍSICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA
TUCUMÁN- ABRIL 2019

B24 - "SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA E INHIBICIÓN DE BIOFILM DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN DERIVADOS DE UNA DIAZEPINA TRIFLUOROMETIL SUSTITUIDA"

M. Rocha,¹ G.A. Echeverría,² O.E. Piro,² J.J. Jios,³ R. D. I. Molina,⁴ M.E. Arena,⁴ S.E. Ulic,^{5,6} Diego M. Gil¹

¹ INQUINOA (CONICET-UNT). Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia. Universidad Nacional de Tucumán. San Lorenzo 456. T4000CAN. San Miguel de Tucumán. Argentina.

² Departamento de Física, Fac. de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata e IFLP (CONICET-CCT-La Plata), C.C. 67, 1900, La Plata, Argentina. ³ Unidad Plapimu-Laseisic (CIC-UNLP). Dpto de Química, Fac. Cs. Exactas, UNLP, Cno. Centenario e/505 y 508, CP 1897, Gonnet.⁴ INBIOFAL-CONICET (Instituto de Biotecnología Farmacéutica y Alimentaria), Universidad Nacional de Tucumán. ⁵ CEQUINOR (CONICET-UNLP), Fac. Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata, 1900, La Plata, Argentina. ⁶ Dpto. Cs. Básicas, UNLu, Rutas 5 y 7 (6700) Luján; Argentina.

e-mail: rochamarian@gmail.com

Introducción: Las 1,4-diazepinas (DZPs) son compuestos farmacológicamente activos y poseen numerosas aplicaciones en química medicinal. La inclusión de iones metálicos en la estructura de las DZPs suele incrementar sus propiedades farmacológicas y por ende sus complejos metálicos se utilizan ampliamente para el tratamiento de numerosas enfermedades [1]. En esta comunicación se presenta la síntesis, caracterización estructural y la evaluación de algunas propiedades biológicas de complejos de metales de la primera serie de transición y el ligando DZP. **Resultados:** Los complejos se obtuvieron calentando a reflujo la sal del metal de transición (Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Mn^{2+}) y la DZP (ambos disueltos en metanol) en relación estequiométrica 1:2. Los complejos, de fórmula general $[\text{M}(\text{DZP})_2] \cdot n\text{H}_2\text{O}$, se caracterizaron por espectroscopias FTIR, Raman y UV-visible en solución y en estado sólido, y se estudiaron los mecanismos de descomposición térmica mediante análisis termogravimétrico (TGA). Para el complejo de Cu(II) se obtuvieron monocristales y se resolvió su estructura cristalina mediante DRX. El complejo cristaliza en el sistema monoclinico, grupo espacial $P2_1/c$. Además, se estudiaron las propiedades antibacterianas y de inhibición de biofilm frente a bacterias Gram negativas y Gram positivas del ligando y de todos los complejos.

Conclusiones: A partir de los resultados de DRX para el complejo de Cu(II), se observa que las interacciones intermoleculares del tipo $\text{N-H} \cdots \text{O}$ estabilizan fuertemente la estructura. Por otro lado, la presencia de Co^{2+} , Cu^{2+} y Mn^{2+} aumentó las propiedades anti-biofilm (respecto al ligando libre) de los complejos (cepa Gram (-)), siendo esta actividad mucho más relevante que la antibacteriana. El Mn^{2+} fue el ion que produjo la mayor inhibición a las dos concentraciones estudiadas (10 y 100 $\mu\text{g}/\text{mL}$). Para la cepa Gram(+), todos los iones metálicos fueron capaces de inhibir el crecimiento bacteriano. Cabe destacar que el Co^{2+} , a una concentración de 100 $\mu\text{g}/\text{mL}$, produjo una inhibición del 90% del crecimiento bacteriano e inhibió completamente la formación de biofilm.

Referencias

1) G. Borkow, J. Gabbay, Curr. Med. Chem., **2005**, 12, 2163-2175.