

XXIII SINAQO

LIBRO DE RESUMENES



*Simposio Nacional de
Química Orgánica
Córdoba, 2021*



**SOCIEDAD ARGENTINA DE INVESTIGACIÓN
EN QUÍMICA ORGÁNICA**



**SIMPOSIO NACIONAL DE QUÍMICA ORGÁNICA
CÓRDOBA - ARGENTINA 2021**

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



1,2,3-TRIAZOLES COMO INHIBIDORES ENZIMÁTICOS DEL FACTOR Xa

Fabián Santana-Romo,¹ Esteban Bjerg,² Yanina Moglie,² Gabriel Radivoy,² Flavia C. Zacconi^{1,3}

¹Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile.

²INQUISUR-CONICET. Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, 8000, Argentina.

³Institute for Biological and Medical Engineering, Schools of Engineering, Medicine and Biological Sciences, Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile.

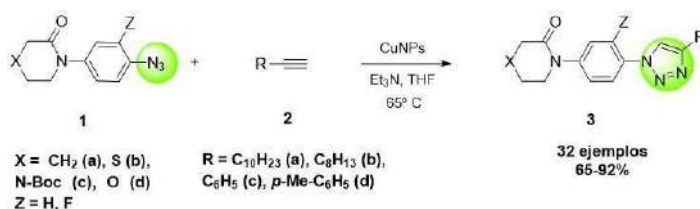
ymoglie@gmail.com

palabras claves: Triazoles, Factor Xa, Nanocatalizadores Metálicos

Los triazoles son moléculas heterocíclicas de 5 miembros ampliamente estudiados debido a sus potenciales propiedades como fármacos, antimicrobianos e inclusive como antioxidantes. Estas características se deben, principalmente, a las interacciones que se pueden generar entre el compuesto, conteniendo la estructura del triazol, y los residuos del sitio catalítico de enzimas.^{a,b}

El factor Xa (FXa) es una serínproteasa del tipo tripsina, juega un papel clave en la coagulación, por ser la parte central de la cascada de la coagulación sanguínea, al catalizar la producción de trombina para inhibir la formación de coágulos. Por lo tanto, el FXa es un blanco farmacológico de enfoque para el desarrollo de potenciales nuevos anticoagulantes, donde los triazoles se vislumbran como un nuevo grupo de moléculas activas frente a esta enzima.^c

En el presente trabajo, reportamos el diseño, síntesis y evaluación biológica de nuevos 1,2,3-triazoles incorporando en su estructura un anillo de lactama con diferentes heteroátomos (C, S, O, *N*-Boc) en posición 4. Los triazoles fueron preparados a través de una cicloadición 1,3-dipolar entre azidas aromáticas y alquinos terminales catalizada por nanopartículas de cobre (10 mol%), trietilamina (10 mol%) utilizada como base, en tetrahidrofurano a 65 °C. Los derivados de triazol se obtuvieron con buenos a excelentes rendimientos del producto aislado y en tiempos cortos de reacción.



Los compuestos conteniendo una lactama con un átomo de O en la posición 4 fueron los más activos frente al FXa, donde el derivado con mayor actividad presentó valores de IC₅₀ menores a 1 μM. Esta investigación permite el desarrollo de nuevos inhibidores del FXa como potenciales anticoagulantes selectivos, con una metodología simple basada en el uso de nanocatalizadores metálicos.

Agradecimientos:

FZ agradece a ANID/CONICYT/Fondecyt Regular N° 1210763.

Referencias:

- a- Alonso, F.; Moglie, Y.; Radivoy, G. *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 2516–2528
- b- Núñez-Navarro, NE.; Santana FM.; Parra LP.; Zacconi FC. *Curr. Med. Chem.* **2019**, *26*, 3175-3200.
- c- Santana-Romo, F.; Lagos, C.F.; Duarte, Y.; Castillo, F.; Moglie, Y.; Maestro, M. A.; Charbe, N.; Zacconi, F.C. *Molecules* **2020**, *25*, 491-529.