ASOCIACION QUIMICA ARGENTINA

XXXII Congreso Argentino de Química

Buenos Aires, 12 al 15 de marzo de 2019

Avda. Santa Fe 1145 Buenos Aires, ARGENTINA

ISBN 978-987-47159-0-6

XXXII Congreso Argentino de Química ; compilado por Arturo Vitale. - 1a ed. -
Buenos Aires : Asociación Química Argentina, 2019.
Libro digital, PDF

Archivo Digital: online
ISBN 978-987-47159-0-6

1. Ciencias Químicas. I. Vitale, Arturo, comp.
CDD 540

ISBN 978-987-47159-0-6

9 789874 715906

Autoridades de la Asociación Química Argentina

Comisión Directiva

Presidente: Dr. Carlos O. Cañellas

Vicepresidente: Dr. Alberto L. Capparelli

Secretaria: Dra. Alicia B. Pomilio

Prosecretario: Dr. Isaac Marcos Cohen

Tesorero: Dr. Arturo Vitale

Protesorero: Tco. Qco. Claudio Salvador

Director de Biblioteca: Dr. Máximo Barón

Vicedirectora de Biblioteca: Dra. Irene Dasso

Vocales Titulares
Dr. Angel Alonso
Dra. Stella M. Battista
Dr. Eduardo A. Castro
Dr. Pablo Duchowicz
Dr. Alberto Lazarowski
Dr. Jorge Ciprian Ollivier
Lic. Enrique Rodger

Vocales Suplentes
Dr. Luis Bruno-Blanch
Dr. Franco Cabrerizo
Dra. Alicia Jubert
Dr. Gustavo Ruiz

Órgano de Fiscalización
Titulares
Dr. Juan M. Castagnino †
Dr. Andrew Mercader
Dr. Víctor Szewczuk
Suplentes
Dr. Mario Feliz

Revista Industria y Química
Director: Dr. Alberto L. Capparelli
Comité de Redacción: Dr. Mariano Fonticelli, Dra. Lydia Galagovsky y Tco. Qco. Claudio Salvador.

Revista Anales de la Asociación Química Argentina
Directora: Dra. Susana Larrondo

Coordinador de Cursos
Tco.Qco. Claudio Salvador

XXXII Congreso Argentino de Química
Buenos Aires, 12 al 15 de marzo de 2019

Comité Científico

- Dra. Cristina Añon
- Dr. Enrique Baran
- Dra. Diana Bekerman
- Dra. Maria del Pilar Buera
- Dr. Ernesto Calvo
- Dr. Isaac Marcos Cohen
- Dra. Rosa Erra Balsells
- Dra. Alicia Fernandez Cirelli
- Dra. Nilda Fink
- Dr. Mariano Fonticelli
- Dra. Lydia Galagovsly
- Dra. Susana Larrondo
- Dra. Nelida Peruchena
- Dra. Sandra Signorella
- Dr. Rolando Spanevello
- Dra. Mabel Tomás
- Dra. Noemí Elisabeth Walsöe de Reca
- Dra. Liliana Gassa
- Dr. Sebastian Cavalitto
- Dr. Damian Marino
- Dr. Carlos Cobos
- Dr. Ezequiel Wolcan
- Dr. Andrew Mercader
- Dr. Pablo Romanelli
- Dra. Rosana Lobayan
- Dr. Hectir Odetti
- Dra. Sandra Hernandez
- Dra. Rosario Soriano
- Dra. Cecilia Castells
- Dra. Alicia Penissi
- Prof. Dr. Alan Talevi

Comité Organizador

AQA :: Asociación Química Argentina
Presidente: Dr. Carlos O. Cañellas

- Dr. Ángel Alonso
- Dra. Stella M. Battista
- Dr. Juan Miguel Castagnino †
- Dr. Jorge Ciprian Ollivier
- Dra. Irene Dasso
- Dra. Alicia Jubert
- Dr. Andrew Mercader
- Lic. Enrique Rodger
- Dr. Víctor D. Szewczuk
- Dr. Máximo Barón
- Dr. Alberto L. Capparelli
- Dr. Eduardo A. Castro
- Dr. Isaac Marcos Cohen
- Dr. Pablo Duchowicz
- Dr. Alberto Lazarowski
- Dra. Alicia B. Pomilio
- Tco. Qco. Claudio Salvador
- Dr. Arturo A. Vitale

XXXII Congreso Argentino de Química
Buenos Aires, 12 al 15 de marzo de 2019

SUBSIDIADO ESPECIALMENTE POR

CONICET

PRINCIPALES AUSPICIANTES

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

UNIVERSIDAD KENNEDY

Sociedad Científica Argentina

Índice General

- Editorial
- Programa
- Conferencias , Simposios y Mesas Redondas
- Resumen de Trabajos por Área
- Trabajos Completos por Área:

  01) Química Analítica
  02) Química Inorgánica y Química Bioinorgánica
  03) Química Orgánica
  04) Química Física
  05) Química Industrial, Química Tecnológica y Ciencia de los Materiales
  06) Química Medicinal
  07) Química Biológica
  08) Biotecnología en Química
  09) Química Clínica
  10) Química Ambiental, Seguridad e Higiene
  11) Ciencia y Tecnología de Alimentos
  12) Educación en Química
  13) Nanoquímica y Nanotecnología
  14) Química Teórica y Computacional
  15) Radioquímica y Química Nuclear.
- Trabajos por Autores

Hace 150 años Dmtri Mendeleev presentó a la Sociedad Química Rusa su modelo de Tabla Periódica de los Elementos Químicos. En 1912, 43 años después del comienzo de la denominada Química Moderna, un grupo de profesionales argentinos fundó, en el ámbito de la Sociedad Científica Argentina, la Asociación Química Argentina (AQA).

Manteniendo esta dinámica, en 1919 se realizó el Primer Congreso Argentino de Química, al cual le siguieron muchos más y hoy estamos dando inicio al XXXII Congreso Argentino de Química en nuestra sede transitoria en la Sociedad Científica Argentina.

Los últimos años marcaron a nuestra querida AQA, la cual no escapó de la realidad en la cual nos encontrábamos inmersos. Nos dimos cuenta que podíamos llegar a desaparecer como institución científica y tomamos conciencia que la única salida era que el problema fuera asumido como prioritario y que la o las soluciones fueran continuadas en el tiempo, sin importar quienes conformen la Comisión Directiva de la AQA.

Hoy podemos afirmar que el salvataje fue exitoso y en un par de años volveremos a nuestro tradicional domicilio de la calle Sánchez de Bustamante. Pero el contexto nos decía que realizar este Congreso no iba a resultar sencillo; a pesar de esto lo concretamos.

Hoy tenemos el enorme orgullo de anunciar que la Química Nacional sigue viva y, en consecuencia la AQA también; esto lo afirmamos con los, hasta hoy, 287 inscriptos y 314 trabajos presentados.

Así es que en el Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos le damos la bienvenida al XXXII Congreso Argentino de Química y les agradecemos, a cada uno de ustedes, por el apoyo que nos brindan.

Dr. Carlos Oscar Cañellas
Presidente de la AQA

4-Química Física

[04-001]	**(Z)-1-(2-HIDROXI-5-NITROFENIL)-3-(2-METOXIETILAMINO)-4,4,4-TRIFLUORO-2-BUTEN-1-ONA: ESTUDIO ESTRUCTURAL DE UNA NUEVA AMINOENONA**
Autores: Leonor P. Avendaño Jiménez, Oscar E. Piro, Gustavo A. Echeverría, Jorge L. Jios y Sonia E. Ulic.	
[04-002]	**CINÉTICA Y MECANISMO DE LA REACCIÓN DE DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA DE 3,6-DIFENIL-1,2,4,5-TETROXANO EN SOLUCIÓN DE NITROMETANO**
Autores: Alexander G. Bordón , Andrea N. Pila , Mariela I. Profeta , Jorge M. Romero , y Nelly L. Jorge,	
[04-003]	**RESONANCIA PARAMAGNÉTICA ELECTRÓNICA EN ASFALTENOS PROVENIENTES DE CRUDOS VENEZOLANOS Y SUS RESIDUOS DE VACÍOS**
Autores: Maury S. Hernández, Pedro J. Silva	
[04-004]	**ESTUDIO TERMODINÁMICO DE LA SOLUBILIDAD DE ETILPARABENO EN MEZCLAS COSOLVENTES ACETONITRILO + AGUA A DIFERENTES TEMPERATURAS.**
Autores: Claudia Patricia Ortiz , Diego Ivan Caviedes Rubio , Daniel Ricardo Delgado	
[04-005]	**SOLUBILIDAD DE LA SULFADIAZINA EN MEZCLAS DE (ACETONITRILO + AGUA): MEDICIÓN, CORRELACIÓN, TERMODINÁMICA Y SOLVATACIÓN PREFERENCIAL.**
Autores: Claudia Patricia Ortiz, Diego Ivan Caviedes Rubio, Daniel Ricardo Delgado	
[04-006]	**CAPACIDAD DE LOS MODELOS PREDICTIVOS DE VISCOSIDAD DE MEZCLAS**
Autores: Adriana Elena Sarkozy , Carmen Raquel Barrero , Jorge Álvarez Juliá , Carlos Miguel Marschoff y María del Carmen Grande	
[04-007]	**ANÁLISIS CONFORMACIONAL DEL SULFURO DE DIALILO MEDIANTE LACOMBINACIÓN DE MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS EXPERIMENTALES YTEÓRICOS**
Autores: Bryan E. Arango Hoyos y Rosana M. Romano	
[04-008]	**ADSORCIÓN DE PARACETAMOL SOBRE CARBÓN ACTIVADO Y SÍLICA**
Autores: Agustín Spaltro y Danila Ruiz	
[04-009]	**REACTIVIDAD DEL PEROXIACETILNITRATO EN ATMÓSFERA HÚMEDA**
Autores: Juana Salas, Maximiliano BurgosPaci, Fabio Malanca	
[04-010]	**LA REGULACIÓN DEL CICLO CARDÍACO.**
Autores: Leopoldo Garavaglia, María Magdalena Defeo, Isabel María Irurzun.	
[04-011]	**TIEMPO DE ENVENENAMIENTO PROMEDIO EN LA REACCION 2A + B2 -> 2 AB.**
Autores: Sabrina Noemí Hernandez Guiance, Isabel María Irurzun.	

Síntesis de 4H-piranos con hidrotalcita y su aplicación como inhibidores de Ureasa

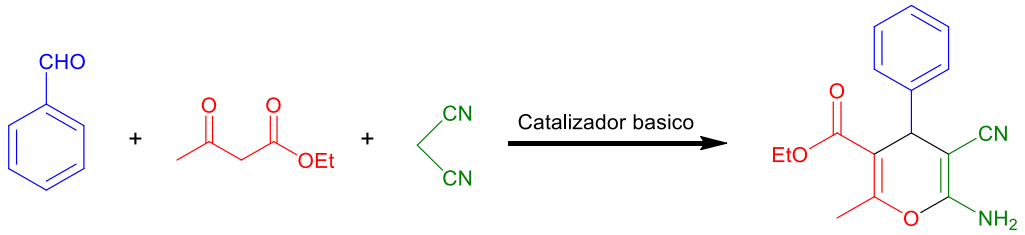
Eliana Nope[1], Annie Vargas[2], Gabriel Sathicq[1], José Martinez[2], Pablo Fetsis[1], Gustavo Romanelli[1].

[1]Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas "Dr. Jorge J. Ronco" CINDECA – Facultad de Ciencias Exactas – Universidad Nacional de La Plata, 47 Nº 257, La Plata 1900, Argentina. elianronova@gmail.com
[2]Escuela de Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia UPTC, Avenida Central del Norte, Tunja, Boyacá, Colombia.

Introducción

Los compuestos 4H-piranos y sus derivados han atraído considerable atención en el campo de la Química Orgánica ya que presentan un amplio espectro de actividades biológicas, estos compuestos son sintetizados bajo condiciones básicas[1, 2]. Las hidrotalcitas son materiales laminares de carácter básico. Su estructura consiste en capas tipo brucita en donde la sustitución de cationes divalentes con trivalentes resulta en una carga neta positiva compensada por aniones interlaminares y aguas de cristalización. Estos materiales presentan excelentes propiedades catalíticas en el campo de la química orgánica [3-5]. Heterociclos nitrogenados o con grupos nitrogenados presentan un amplio espectro de actividades farmacológicas como antimicrobianos, antiflamatorios, analgésicos, inhibidores de enzimas, antioxidantes y anti-cancerígenos[6].

La Ureasa es una enzima que acelera la hidrólisis de la urea en amoniaco y CO_2, la formación continua de amoniaco aumenta la permeabilidad de la mucosa gástrica, lo que causa inflamación, ulceras y otras afecciones estomacales. La causa principal de la ulcera péptica es ahora aceptada o puede ser tratada por la inhibición de la ureasa. Para su inhibición se han investigado varios compuestos como quinolinas, imidazoles, ácidos borónicos y hidroxámicos[7]. De esta manera el objetivo de este trabajo es el desarrollo de un catalizador bimetálico tipo hidrotalcita que permita la obtención de compuestos 4H-piranos (Esquema 1) y su posterior estudio en la inhibición de la enzima ureasa.



Esquema 1. Síntesis de compuestos 4H-Piranos

Experimental

La síntesis de hidrotalcitas tipo MgAl(OH), NiMgAl(OH), CoMgAl(OH)se realizo siguiendo el método de co-precipitación. Para lo cual $Mg(NO_2)_3{\bullet}6H_2O$, $Al(NO_3)_3{\bullet}9H_2O$ y urea se disolvieron en agua destilada, con una relación molar de Mg^{2+}/Al^{3+} = 3. Posteriormente

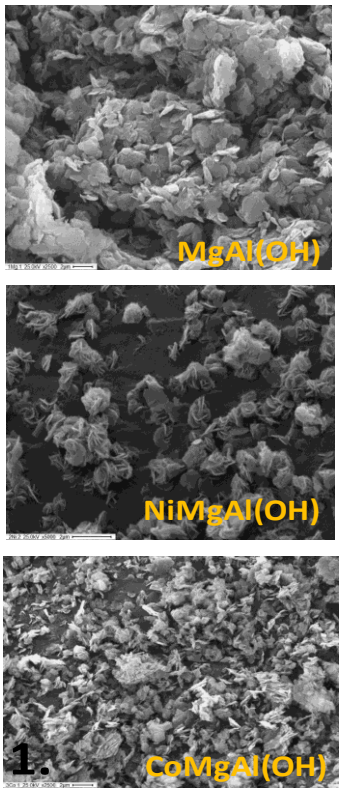
una solución de NaOH y Na_2CO_3 2M se adiciono hasta alcanzar un pH=10; la mezcla se envejeció durante 24 h a 140°C, luego se filtró y secó a 80°C.

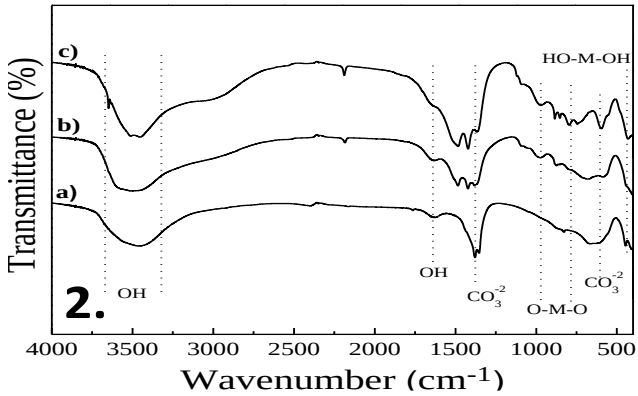
Los materiales sintetizados se caracterizaron por las técnicas: isotermas de fisisorción de N_2 a 77K, difracción de rayos X, espectroscopia infrarroja y microscopia electrónica de barrido. La actividad catalítica se evaluó en la síntesis de compuestos 4H-piranos, se estudiaron parámetros como temperatura, tiempo, solvente y efecto del metal en las hidrotalcitas con el fin de optimizar la reacción. El seguimiento se realizo por cromatografía liquida de alta resolución HPLC.

Para los estudios de la inhibición de la enzima ureasa se evaluó la actividad de la enzima libre e inmovilizada, para lo cual se incubaron cantidades conocidas de enzima en soluciones de urea en buffer fosfatos 0,01 M a pH 5,8. El amonio en solución liberado de la hidrólisis de la urea se determinó por el método colorimétrico con purpura de bromocresol. La determinación de la Constante de Michaelis Mente, se llevó a cabo por el método de linealización de Lineweaver-Burk con una concentración de 50 µL de ureasa inmovilizada en los compuestos 4H-piranos con un tiempo de reacción de 10 minutos.

Resultados

Las micrografías de los materiales sintetizados (figura 1.) muestran la formación de capas laminares, además se observa que la hidrotalcita de NiMgAl(OH) presenta una mejor distribución de las capas. Todas las muestras exhiben los patrones de difracción de rayos X característicos de la estructura de la hidrotalcita[8].





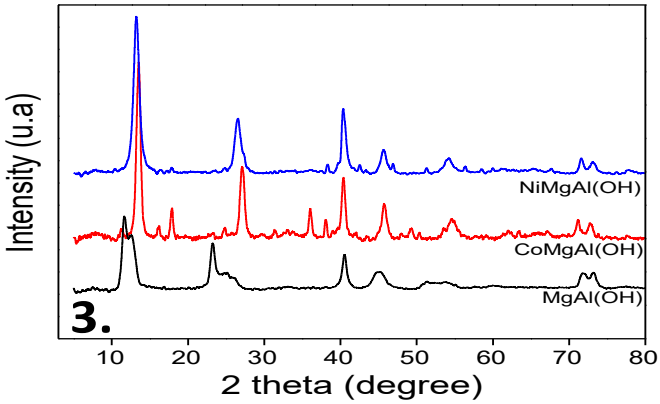


Figura 1. 1) Micrografías SEM. **2)** Espectros infrarojo a) MgAl(OH), b) NiMgAl(OH), c) CoMgAl(OH). **3)** Patrones de difracción de rayos X.

Las hidrotalcitas sintetizadas se estudiaron en la síntesis de heterociclos de la familia 4H-piranos, tomando una mezcla entre benzaldehído, malononitrilo y acetoacetato de etilo como reacción test. Inicialmente el estudio de la incorporación de otro metal en la hidrotalcita de MgAl(OH) causa un efecto en la reacción y da como resultado que la formación del producto se favorece utilizando NiMgAl(OH). Las condiciones óptimas que se encontraron para la reacción son: 45 mg de catalizador, 80°C y 12 horas bajo condiciones libres de solvente, obteniendo una conversión del 97% hacia el 4H-pirano. Una vez obtenidas estas condiciones se realizó la síntesis de 10 derivados de 4H-piranos y se estudiaron en la inhibición de la enzima ureasa.

Tabla 1. Seguimiento de la reacción con NiMgAl(OH).

Tiempo (H)	Conversión (%) Intermediario	Conversión (%) Pirano
0	99	0
0,5	43	56
1	38	61
2	18	82
3	29	71
6	15	84
8	9	90
12	3	97
16	9	91
24	6	94

Condiciones de reacción: 1mmol de benzaldehído, 1mmol de malononitrilo, 1mmol acetoacetato de etilo, sin solvente a 80°C.

Para este estudio se definió una unidad internacional de actividad (UI) como 1 µmol de urea hidrolizada por minuto. Los resultados muestran que dependiendo del grupo funcional la inhibición de la enzima se ve afectada por este parámetro, sin embargo en la mayoría de los compuestos se favorece la inhibición de esta enzima. Así compuestos que presentan grupos funcionales aceptores de electrones presentan mayores porcentajes de actividad específica.

Conclusiones

Los materiales tipo hidrotalcita favorecen la síntesis multicomponente de derivados de compuestos 4H-piranos con conversiones del 97% con la hidrotalcita NiMgAl(OH) en 12 horas de reacción, permitiendo la fácil separación y recuperación del catalizador del medio de reacción. Los estudios de inhibición de la enzima demuestran que con 25 mg de los compuestos 4H-piranos se logra la inhibición de la ureasa, sin embargo la inhibición se ve afecta por la naturaleza del grupo funcional presente en el aldehído del compuesto 4H-pirano.

Referencias

1. Cioc, R.C., E. Ruijter, and R.V.A. Orru, *Multicomponent reactions: advanced tools for sustainable organic synthesis.* Green Chemistry, 2014. **16**(6): p. 2958-2975.
2. Pagadala, R., S. Maddila, and S.B. Jonnalagadda, *An Efficient, Multicomponent, One-pot Synthesis of Tetra Substituted Pyrans in Water.* Journal of Heterocyclic Chemistry, 2015. **52**(4): p. 1226-1229.
3. Bhattacharyya, P., et al., *Nano crystalline ZnO catalyzed one pot multicomponent reaction for an easy access of fully decorated 4H-pyran scaffolds and its rearrangement to 2-pyridone nucleus in aqueous media.* Tetrahedron Letters, 2012. **53**(35): p. 4687-4691.
4. Hubert, C., et al., *Brønsted Acid-Catalyzed Synthesis of Pyrans via a Formal [3+3] Cycloaddition.* Advanced Synthesis & Catalysis, 2008. **350**(1): p. 40-42.
5. Bihani, M., et al., *Amberlyst A21: A reusable solid catalyst for green synthesis of pyran annulated heterocycles at room temperature.* Comptes Rendus Chimie, 2013. **16**(5): p. 419-426.
6. Ahmed, M., et al., *Azomethines, isoxazole, N-substituted pyrazoles and pyrimidine containing curcumin derivatives: Urease inhibition and molecular modeling studies.* Biochemical and Biophysical Research Communications, 2017. **490**(2): p. 434-440.
7. Rego, Y.F., et al., *A review on the development of urease inhibitors as antimicrobial agents against pathogenic bacteria.* Journal of Advanced Research, 2018. **13**: p. 69-100.
8. Chagas, L.H., et al., *MgCoAl and NiCoAl LDHs synthesized by the hydrothermal urea hydrolysis method: Structural characterization and thermal decomposition.* Materials Research Bulletin, 2015. **64**: p. 207-215.