

INFLUENCIA DEL SOLVENTE EN EL AUTOENSAMBLADO DE LA MELAMINA. ESTUDIO ESTÁTICO Y DINÁMICO

Petelski, Andre Nicolai¹; Pamies, Silvana Carina¹; Sosa, Gladis Laura¹ y Nélica, María Peruchena²

¹Grupo de Investigación en Química Teórica y Experimental (QUITEX), FRRe, UTN, French 414, H3500CHJ, Resistencia, Chaco, Argentina.

²Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA), UNNE-CONICET, Avenida Libertad 5460, 3400, Corrientes, Argentina.

npetelski@frre.utn.edu.ar

Introducción: La amelina (AM, **Fig. 1a**) es el primer derivado de la hidrólisis de la melamina (M) o 2,4,6-triamino-1,3,5-triazina. Debido a la presencia de múltiples sitios dadores (D) y aceptores (A) de puentes de hidrógeno (PH), la AM es capaz de formar hexámeros cíclicos con una elevada cooperatividad. Estas estructuras, relevantes en la química supramolecular, no han sido estudiadas en detalle. Es por ello que en este trabajo se estudia la capacidad auto-ensamblante de la AM en fase gaseosa, en medio acuoso y en cloroformo. Mediante cálculos DFT-D se analizaron las estabildades de todos los dímeros posibles que puede formar la AM mediante sus diferentes combinaciones (**Fig. 1b y c**). A fin de estudiar la influencia del solvente se simularon por dinámica molecular (DM) mezclas al 50% en peso de AM:H₂O y AM:CHCl₃ para aquellos dímeros más favorecidos energéticamente. **Resultados:** Los cálculos DFT-D [BLYP-D3(BJ)/6-311++G(d,p)] indican que los dímeros formados por puentes N-H...O son los más favorecidos termodinámicamente en el orden: xy* > xx > xy > xz (ver **Fig. 1**).

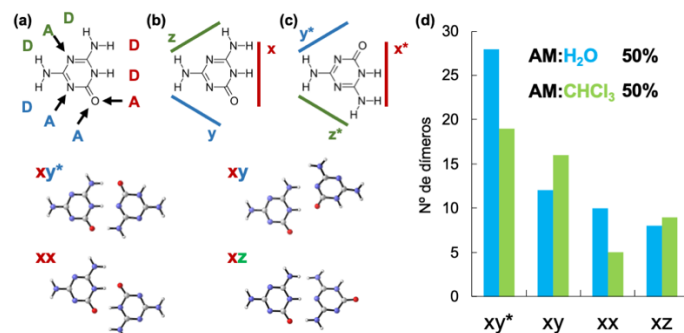


Figura 1. (a) Estructura molecular de la AM con sus sitios dadores (D) y aceptores (A) de PH. (b) Cara 1 de la AM (c) Cara dos de la AM. (d) Número de dímeros formados en mezclas al 50% con los solventes agua y cloroformo.

Además, la polaridad del medio disminuye la energía de unión. Los resultados de DM muestran que en ambos solventes predominan los dímeros del tipo xy*.

Conclusiones: Nuestros resultados muestran la elevada capacidad auto-ensamblante de la AM prevaleciendo en número y en estabilidad de 2 tipos de dímeros. Se observa que un solvente menos polar disminuye la estabilidad de los mismos. En cloroformo, por ejemplo, aumenta la frecuencia de aquellos dímeros que permanecen unidos por



XXIII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA
EL CALAFATE 2023

más tiempo, como por ejemplo el dímero **xy**, uno de los más buscados, debido a que da origen a estructuras cíclicas.