



XXIV Simposio Nacional de Química Orgánica

Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica

Rosario - Santa Fe - Argentina
5 al 8 de Noviembre de 2023



ADSORCIÓN DE CATEQUINA Y UN DERIVADO SULFITADO EN FAUJASITA

María F. Zalazar¹, Emilio Angelina¹, Nicolai A. Petelski², Darío J. Duarte¹ y Nélide M. Peruchena¹

¹Laboratorio de Estructura Molecular y Propiedades (LEMyP), Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA, CONICET-UNNE), Corrientes, 3400, Argentina. m Zalazar@conicet.gov.ar.

²Grupo de Investigación en Química Teórica y Experimental (QUITEX), Facultad Regional Resistencia, Universidad Tecnológica Nacional, Resistencia, 3500, Argentina.

Palabras clave: ADSORCIÓN DE POLIFENOLES, ZEOLITAS MICROPOROSAS, DFT

Las zeolitas son materiales prometedores para adsorber compuestos biomásicos debido a sus propiedades fisicoquímicas, baja toxicidad, estabilidad térmica, amplia área superficial, intercambio iónico y capacidad de adsorción. Estudios previos resaltaron la eficacia de la zeolita Beta en comparación con adsorbentes comerciales para atrapar polifenoles (PFs) en extractos de semillas de trigo y canola.¹ Estos materiales tienen potencial para procesos de aislamiento y recuperación selectiva de polifenoles en aguas residuales alimentarias.² Se conoce también las potencialidades de zeolitas naturales como portadores de fármacos, especialmente en la microencapsulación de extractos ricos en catequinas y su liberación controlada.³ Estos materiales tienen potencial en campos tecnológicos donde las interacciones huésped-anfitrión son clave, como aquellos que involucran como adsorbentes materiales silíceos con el fin de agregar valor a derivados del tanino de quebracho chaqueño. En este trabajo se estudió la zeolita faujasita (FAU) para la encapsulación de catequina y su derivado sulfitado, componentes presentes en tanino de quebracho colorado chaqueño. Los cálculos se realizaron con el programa Gaussian16 y el método ONIOM de dos capas a nivel M06-2X/6-31+G(d,p):PM6. Los resultados ofrecen información sobre la disposición espacial más favorable en la cavidad de FAU, donde la adsorción de catequina es más favorable frente a su derivado monosulfitado ($E_{ads} = -23$ Kcal/mol vs -16 Kcal/mol). Las energías de adsorción halladas sugieren la viabilidad del proceso respaldando la perspectiva de emplear la zeolita microporosa FAU para la captura de monómeros de polifenoles presentes en tanino vegetal y separarlos así de polifenoles de mayor peso molecular, como trímeros y tetrámeros de catequina.

Referencias:

1. Thiel, A.; Tippkötter, N.; Suck, K.; Sohling, U.; Ruf, F.; Ulber, R. *Eng. Life Sci.* **2013**, *13*, 239-246.
2. Hellwig, V.; Gasser, J. *Phytochem. Rev.* **2020**, *19*, 1539-1546.
3. Yaneva, Z.; Ivanova, D.; Popov, N. *Molecules* **2021**, *26*, 1655.