



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



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

DISEÑO CONTROLADO DE PATRONES DE UNION DE MELAMINA

Petelski, Andre N., Martín, Leopoldo, Aguayo, José; Bessonne, Juan F.; Ortiz, Gonzalo; Nuñez, Ivan; Pamies, Silvana C. y Sosa, Gladis Laura.

Grupo UTN de Investigación en Química Teórica y Experimental. Departamento de Ingeniería Química. Facultad Regional Resistencia. Universidad Tecnológica Nacional. French 414 (H3500CHJ), Resistencia, Chaco, Argentina.
npetelski@frre.utn.edu.ar

Introducción: El diseño y síntesis de materiales emergentes, tales como las redes orgánicas de enlaces de hidrógeno¹ (HOFs, por sus siglas en inglés), requiere un conocimiento muy fino y detallado de las interacciones puestas en juego. En este campo, es sabido que números factores pueden afectar la estabilidad de las interacciones entre fragmentos moleculares. Es por ello que en este trabajo se estudia el efecto de determinadas modificaciones covalentes sobre la formación de puentes de hidrógeno en dímeros de melamina (M). **Resultados:** Los cálculos de estructura electrónica, realizados al nivel BLYPD3(BJ)/aug-cc-pVDZ, demuestran que los grupos funcionales de la M pueden favorecer un tipo especial de dímero (ver Figura). Esto se debe principalmente a que las modificaciones covalentes afectan las interacciones orbitales que se dan entre los pares de electrones libres de los átomos de N (endocíclico) con los orbitales anti-enlazantes N–H de los grupos amino.

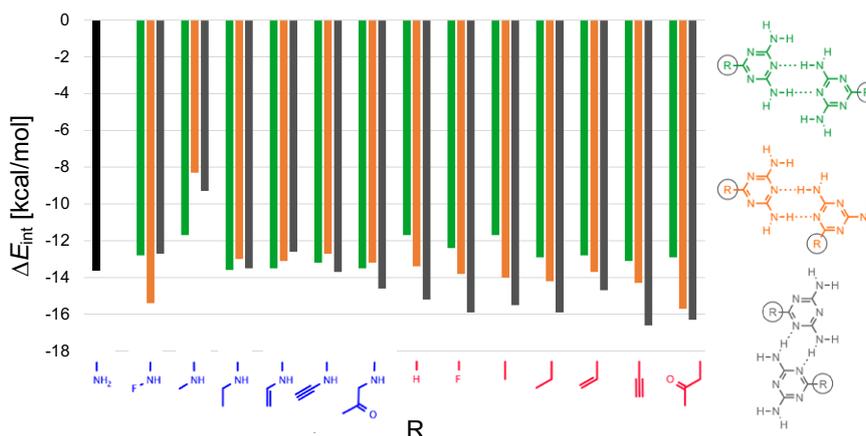


Figura 1. Energías de interacción para los tres tipos de dímero que se pueden dar en la M modificada para cada tipo de grupo R.

Conclusiones: los resultados preliminares permitirían, en principio, evaluar qué modificación covalente es necesaria para favorecer un determinado tipo de asociación a la hora de diseñar un sistema supramolecular con un patrón específico.

Referencias

- 1) Han, Y.-F.; Yuan, Y.-X. Yuan; Wan, H.-B. *Molecules*, **2017**, 22, 266