

ESTUDIO COMPARATIVO DE LA ADSORCIÓN DE UN POLIFENOL NATURAL Y UNO SULFITADO SOBRE UN MESOPORO MODELO DE SÍLICA

S. Tenev Monicault,^a N. E. Esquenazi, A. N. ^a Petelski,^a L. E. Angelina,^b N. M. Peruchena,^b M. F. Zalazar^b

[a] Centro de Investigación en Química e Ingeniería Teórica y Experimental (QUITEX), UTN - FRRe. French 414 (H3500CHJ), Resistencia, Chaco, Argentina.

[b] Laboratorio de Estructura Molecular y Propiedades (LEMYP) – Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA, CONICET-UNNE). Avenida Libertad 5470, Corrientes, Argentina.

@quitex.utn
@lemyp.iquiba.nea

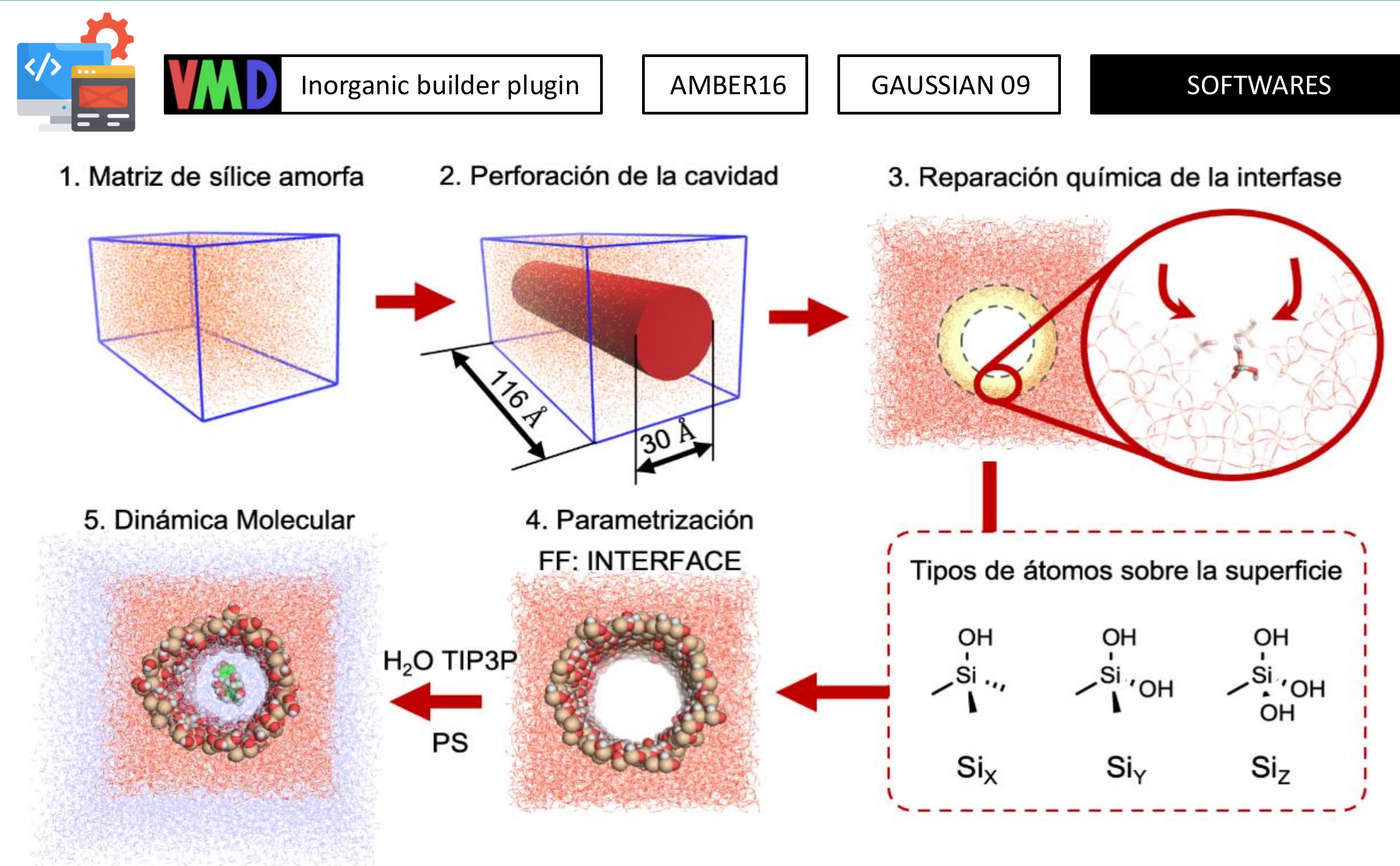
Sofía Tenev Monicault

sofiatenevmonicault
@frre.utn.edu.ar

INTRODUCCIÓN

Los materiales silicios de la familia M41S son materiales prometedores para adsorber compuestos biomásicos debido a sus propiedades fisicoquímicas, como la capacidad de adsorción. Tienen un gran potencial en campos tecnológicos donde las interacciones huésped-anfitrión son clave, como aquellos que involucran como adsorbentes materiales silicios con el fin de agregar valor a derivados del tanino de quebracho chaqueño. Recientemente, se ha reportado el encapsulamiento de extractos fenólicos en MCM-41 con el fin de mejorar su estabilidad química y preservar sus propiedades antioxidantes. Con el fin de comprender los mecanismos de adsorción de polifenoles en materiales silíceos mesoporosos, en este trabajo se realiza un estudio de Dinámica Molecular (DM) de un polifenol natural (PN) y uno sulfitado (PS) en un mesoporo modelo de 30 Å de diámetro y 116 Å de longitud. Los polifenoles fueron seleccionados dada su presencia en productos obtenidos del tratamiento industrial del tanino de quebracho chaqueño (*schinopsis balansae*). Los resultados preliminares sugieren que el PN se adsorbe mejor a la superficie del poro que el PS, debido a que el primero forma puentes de hidrógeno más estables con los grupos OH de la superficie.

DETALLES COMPUTACIONALES



El PN y PS fueron construidos y optimizados al nivel M06-2X/6-31+G(d,p) de teoría utilizando el software Gaussian 09. Fueron parametrizados con el campo de fuerzas gaff.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

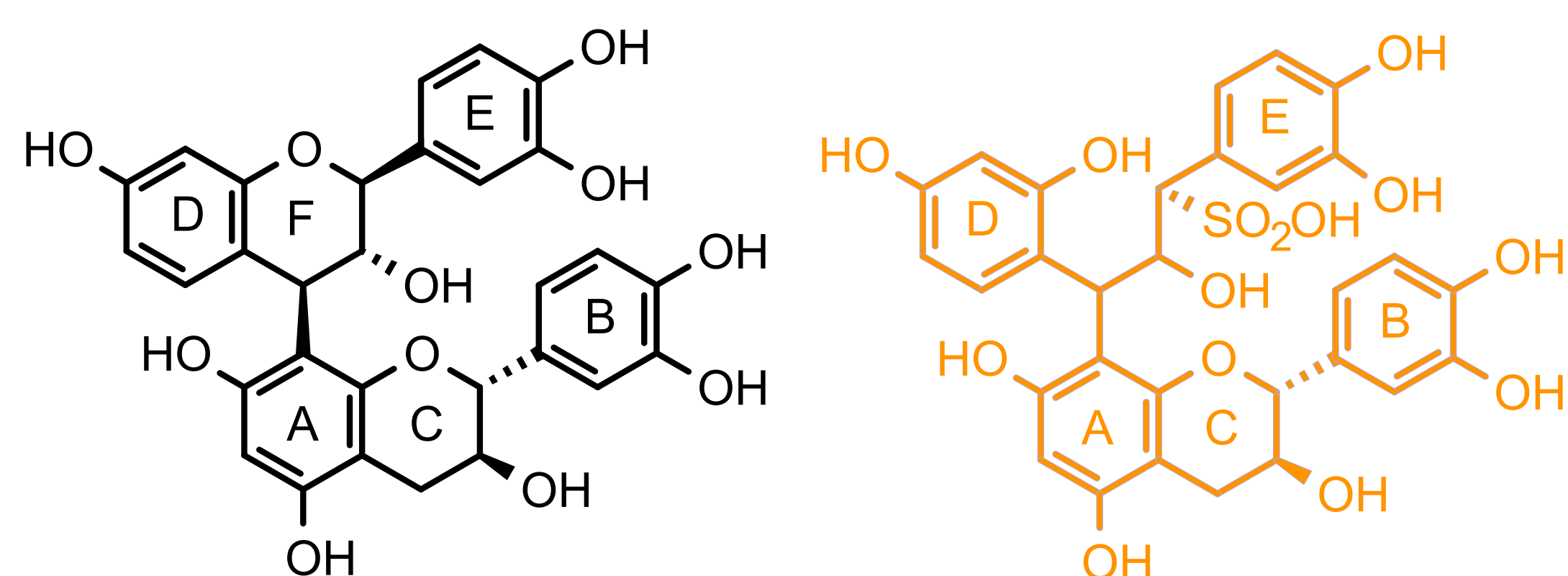


Figura 1. Estructura molecular del polifenol natural (izquierda) y sulfitado (derecha).

Los resultados de la DM revelan que, a los pocos nanosegundos, ambos dímeros se adhieren a la superficie del poro. Para identificar qué polifenol presenta interacciones más fuertes, se realizó un análisis de los puentes de hidrógeno (PH) en ambos sistemas.

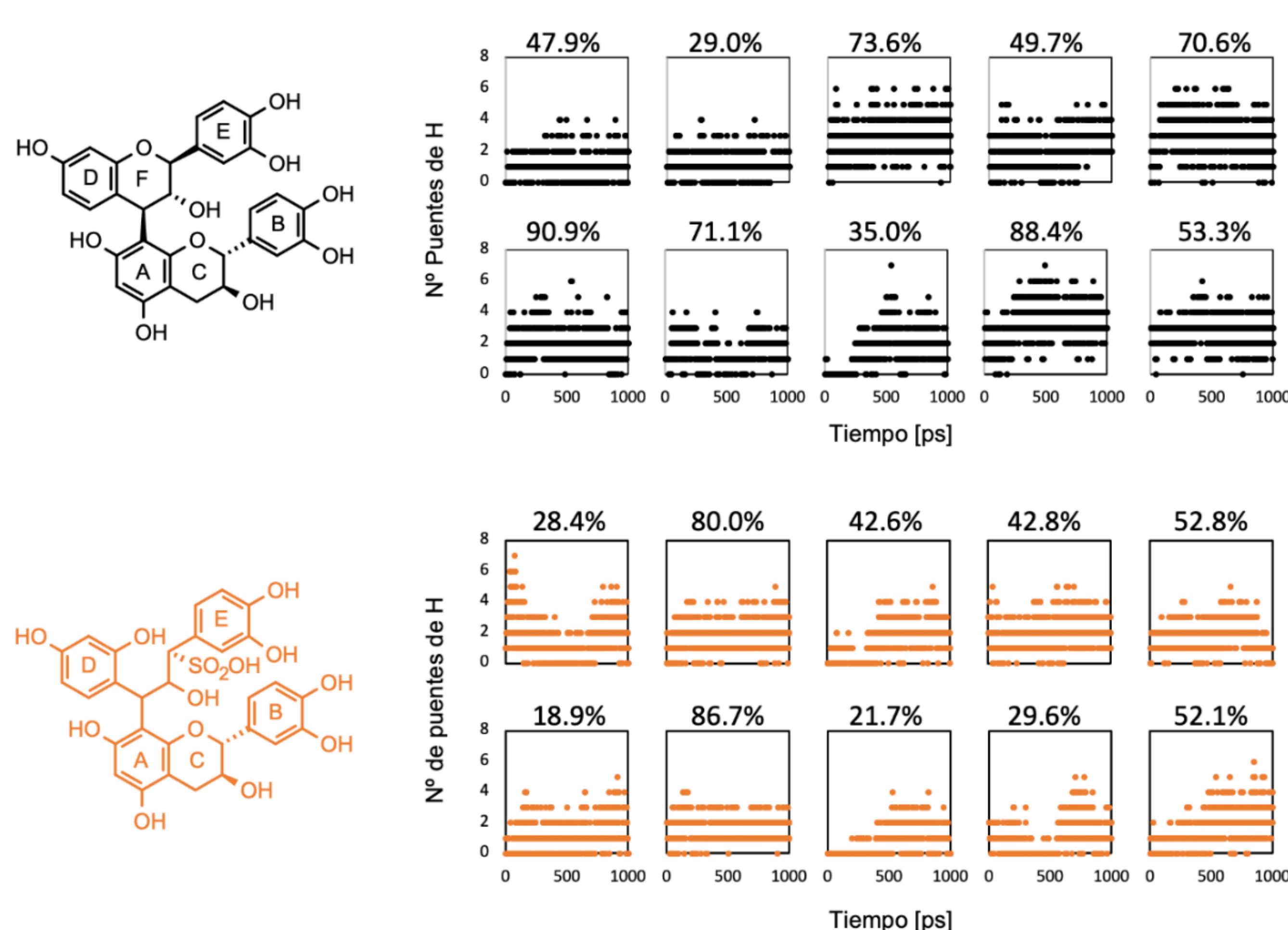


Figura 2. N° de puentes de hidrógeno en función del tiempo para las 10 réplicas. Los porcentajes indican el máximo de ocupación alcanzado por un PH en la réplica.

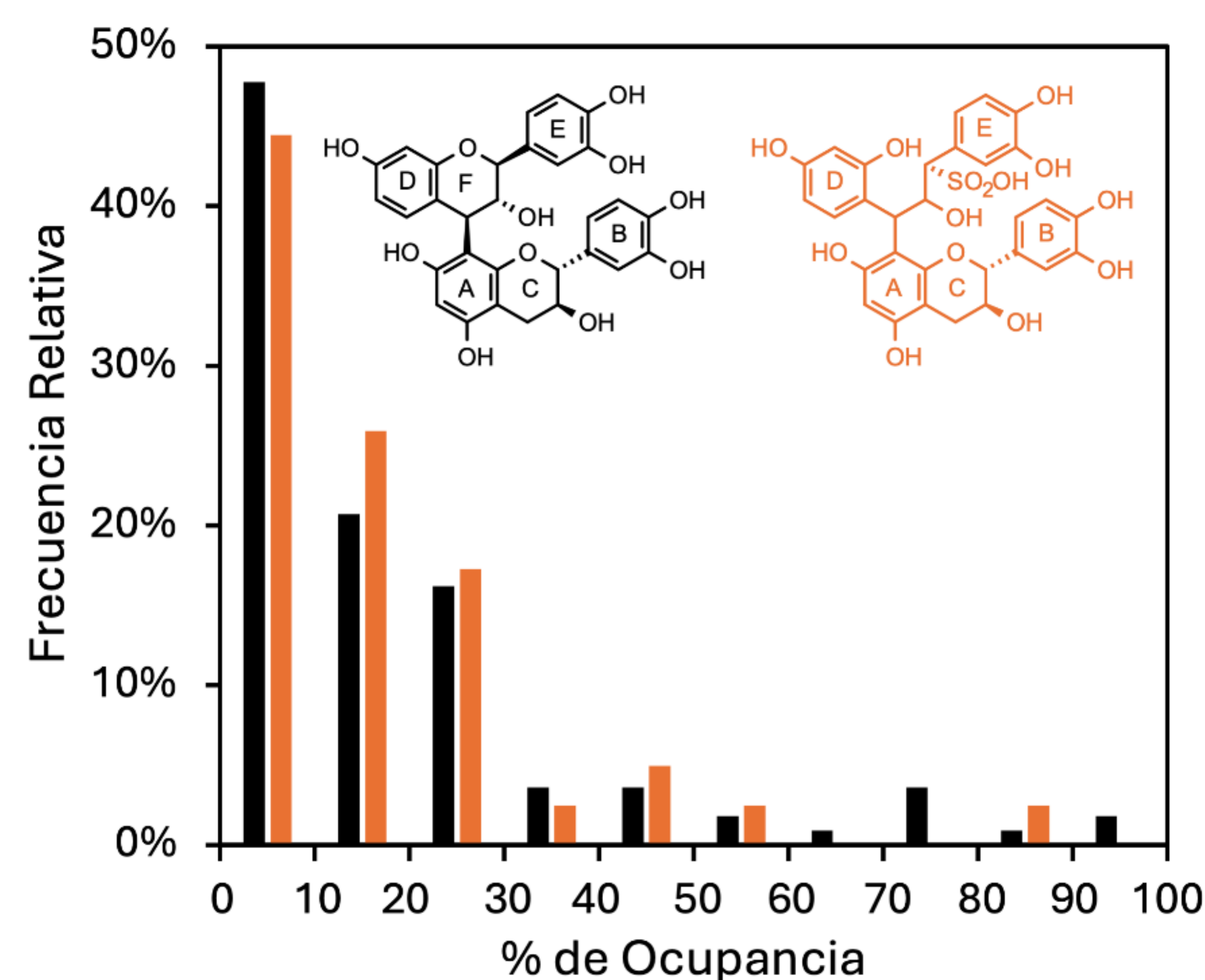


Figura 3. Frecuencia relativa del número de puentes de hidrógeno para cada porcentaje de ocupación para cada polifenol.

De la **Figura 2** se puede concluir que el PN presenta mayor cantidad de réplicas con PH con porcentajes de ocupación grandes (tres entre 70%-80%, uno entre 80%-90% y uno entre 90%-100%); a diferencia del PS (dos entre 80%-90%).

Para realizar un análisis estadístico más exhaustivo se procedió a promediar las contribuciones de todas las réplicas realizadas (**Figura 3**). Se puede observar que el PN se adhiere ligeramente con más fuerza a la superficie ya que el porcentaje de número de PH es mayor a ocupaciones mayores.

En **conclusión**, el análisis sugiere que el PN posee ligeramente una mayor afinidad por la superficie de sílica en comparación con el PS, debido a la mayor estabilidad y ocupación de los puentes de hidrógeno formados. Esto implica que la adsorción del PN en el mesoporo de sílica podría ser más eficaz y residir más tiempo en él.

REFERENCIAS

Ribeiro-Santos, T. A., Henriques, F. F., Villarroel-Rocha, J., et al. (2016), Chem. Eng. J., 283, 1203-1209. • Brezoiu, A.-M., Matei, C., Deaconu, M., Stanciuc, A.-M., Trifan, A., Gaspar-Pintilie, A. Y Berger, D. (2019), Food Chem. Toxicol., 133, 110787. • Venter, P. B., Senekal, N. D., Amra-Jordaan, M., Bonnet, S. L. y Van der Westhuizen, J. H. (2012), Phytochemistry 78, 156-169.

AGRADECIMIENTOS

BECAS EVC-CIN
ESTÍMULO A LAS VOCACIONES CIENTÍFICAS

CONICET

BECAS
Estrategias
Manuel Belgrano

SCyT