

MODELADO DE LA DINÁMICA DE ADSORCIÓN DE PROCIANIDINA B3 SOBRE UN MESOPORO DE SÍLICA

Petelski Andre Nicolai¹, Angelina Luis Emilio², Duarte Darío J. R.², Peruchena Nélica María² y Zalazar María Fernanda²

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

²Laboratorio de Estructura Molecular y Propiedades (LEMyP) – Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA, CONICET-UNNE). Avenida Libertad 5470, Corrientes, Argentina.
mfzalazar@conicet.gov.ar

Introducción: La síntesis de materiales silíceos mesoporosos ha atraído el interés científico debido a su capacidad de actuar como tamices moleculares, con potencial aplicación en la adsorción de compuestos derivados de biomasa, de interés en campos en el que la interacción huésped-anfitrión define el comportamiento final del sistema. Recientemente, se ha reportado el encapsulamiento de extractos fenólicos en materiales silíceos del tipo MCM-41¹ para mejorar su estabilidad química y preservar sus propiedades antioxidantes. Con el fin de comprender los mecanismos de adsorción de polifenoles en estos materiales, en este trabajo se realiza un estudio de Dinámica Molecular (DM) de la adsorción de procianidina B3 (PB3) en un mesoporo modelo de 30 Å de diámetro y 116 Å de longitud (**Figura 1.a**). La PB3 fue seleccionada con base en su presencia en el tanino de quebracho chaqueño (*schinopsis balansae*).

Resultados y Conclusiones: Se evaluó la movilidad del polifenol a lo largo del canal del poro. Se observa que éste se adsorbe y desorbe varias veces (**Figura 1.b**). Sin embargo, la PB3 pasa más tiempo interaccionando con las paredes internas del poro, que en el centro del canal. En esos instantes se registran principalmente interacciones del tipo O–H...O, donde la PB3 actúa simultáneamente como dadora y aceptora de puentes de hidrógeno. Actualmente se están evaluando polifenoles de diferente naturaleza y con diferentes grados de polimerización con el fin de analizar el grado de afinidad en el proceso de adsorción.

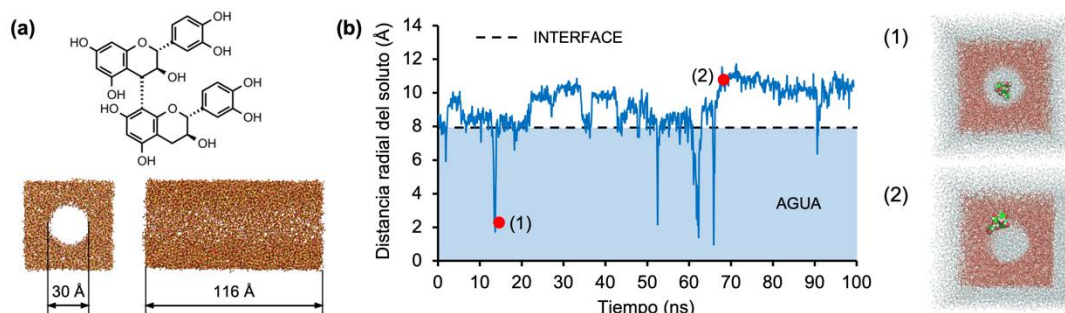


Figura 1. (a) Estructura de la Procianidina B3 y del mesoporo. **(b)** Distancia radial del polifenol en función del tiempo de simulación.

Referencias



XXIII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA

EL CALAFATE 2023

- 1) Brezoiu, A.-M.; Matei, C.; Deaconu, M.; Stanciuc, A.-M.; Trifan, A.; Gaspar-Pintilieșcu, A.; Berger, D. *Food Chem. Toxicol.*, **2019**, 133, 110787.