

# XXIII SINAQO

LIBRO DE RESUMENES



*Simposio Nacional de  
Química Orgánica  
Córdoba, 2021*

## ROSETAS DE MELAMINA SUSTITUIDAS: INTERRELACIÓN ENTRE LA ENERGÍA DE DIMERIZACIÓN Y LOS EFECTOS DE SUSTITUCIÓN

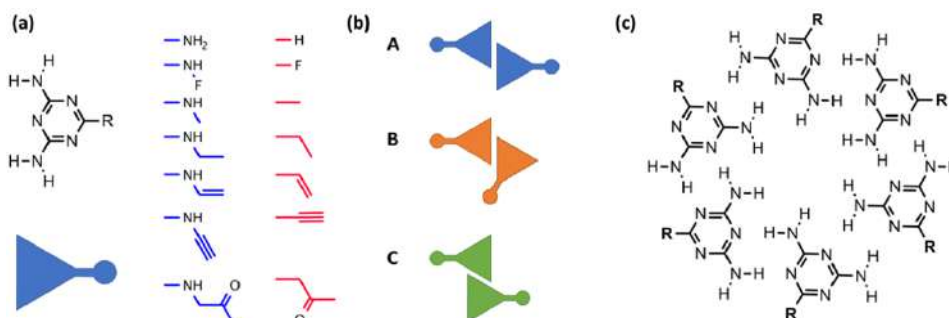
Andre N. Petelski, Silvana C. Pamies, José Aguayo, Nazareth Pujol, Marianela Tofaletti y Gladis L. Sosa

FQO-16

Grupo UTN de Investigación en Química Teórica y Experimental, departamento de Ingeniería Química, Facultad Regional Resistencia, Universidad Tecnológica Nacional, Resistencia, H3500CHJ, Argentina, [npetelski@frre.utm.edu.ar](mailto:npetelski@frre.utm.edu.ar)

### palabras claves: Enlaces de Hidrógeno, Supramolecular, Auto-ensamblado

La melamina (M) es una triamino triazina ampliamente usada en la química supramolecular, dado que es capaz de formar hexámeros cíclicos mediante puentes de hidrógeno. Estas rosetas pueden ser adsorbidas sobre diferentes superficies, o, mediante su apilamiento, pueden formar nanocables.<sup>a</sup> A su vez, los hexámeros forman cavidades capaces de alojar aniones monovalentes.<sup>b</sup> Las unidades de M son además modificadas covalentemente para favorecer el ensamblado de las estructuras mencionadas. Estas modificaciones suelen realizarse sobre el H del amino, o mediante el reemplazo completo de un grupo  $\text{-NH}_2$ .<sup>a</sup> No obstante, hasta la fecha, no se ha considerado el impacto de estas modificaciones sobre la estabilidad de los puentes de hidrógeno. Con este objetivo, en este trabajo se analiza el efecto de diferentes sustituyentes (**Figura 1a**) sobre la energía de dimerización de la M (**Figura 1b**) y su impacto en la formación de hexámeros (**Figura 1c**). Para ello, se analizaron dímeros y rosetas de M al nivel de teoría BLYP-D3(BJ)/6-311++G<sup>\*\*</sup>, con el programa Gaussian 09.



**Figura 1. (a)** Estructura de la M y los sustituyentes R analizados. **(b)** Tipos de dímeros posibles de la M. **(c)** Hexámero cíclico de la M (roseta).

Los resultados muestran que los grupos R favorecen mayoritariamente a un tipo de dímero. En ellos, las interacciones están controladas por factores orbitales y electrostáticos. Si bien el grupo  $\text{-NH-F}$  favorece más al dímero **B** (que da lugar a rosetas) y el grupo  $\text{-CCH}$  favorece al tipo **C** (que da lugar a cadenas 1D), la roseta sustituida con acetileno es 11 kcal/mol más estable que aquella sustituida con  $\text{-NH-F}$ . En conclusión, las modificaciones covalentes sobre la M afectan su autoensamblado. Sin embargo, los factores que controlan a la formación de dímeros no se ve reflejada en la formación de las rosetas.

#### Referencias:

- a- Adhikari, B.; Lin, X.; Yamauchi, M.; Ouchi, H.; Aratsu, K.; Yagai, S. *Chem. Commun.* **2017**, 53, 9663-9683.
- b- Petelski, A. N.; Fonseca Guerra C. *J. Phys. Chem. C* **2020**, 124, 3352-3363.