



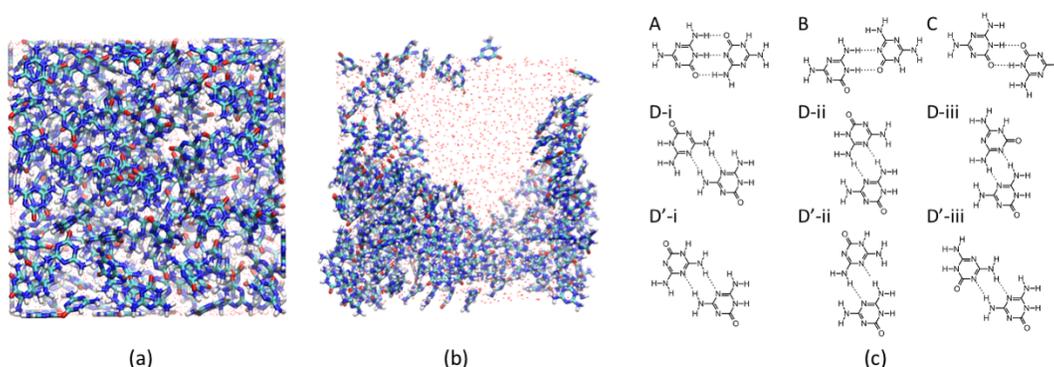
# VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

## Caracterización estática y dinámica del autoensamblado de amelina en medio acuoso

Petelski Andre Nicolai<sup>1</sup>, Pamies Silvana Carina<sup>1</sup>, Martín Leopoldo<sup>1</sup>, Marquez Josefina<sup>1</sup>, Sosa Gladis Laura<sup>1</sup>, Peruchena Nélida María<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> 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, <sup>2</sup> Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA), UNNE-CONICET, Avenida Libertad 5460, 3400 Corrientes, Argentina. npetelski@frre.utn.edu.ar

La amelina (AM) es el primer derivado de la hidrólisis de la melamina (M) o 2,4,6-triamino-1,3,5-triazina. Se sabe que la AM es capaz de formar hexámeros cíclicos con una elevada cooperatividad.<sup>1</sup> Si bien la M es utilizada en la industria del plástico y en la química supramolecular, las propiedades de la AM no han sido exploradas en profundidad. Sólo se ha reportado su uso en resinas de M/AM para aplicaciones en madera. Es por ello que el objetivo de este trabajo es contribuir al conocimiento de las capacidades autoensamblantes de la AM mediante una caracterización estática y dinámica. Para ello se realizó una dinámica molecular (DM) de un sistema AM/agua al 50% con el programa AMBER11 (**Figura 1a-b**). Conjuntamente, se analizaron dímeros de AM al nivel de teoría BLYP-D3(BJ)/6-311++G\*\*, con el programa Gaussian 09, en fase gas y en solución acuosa (modelo PCM).



**Figura 1.** (a) Sistema inicial AM/agua [50%]. (b) Sistema AM/agua [50%] luego de 50 ns. (c) Tipos de dímeros de AM **A**: DDA-AA ( $A$ =aceptor,  $D$ =dador), **B**: DD-AA, **C**: DA-AD ( $N-H\cdots O$ ) **D**: DA-AD ( $N-H\cdots N$ ).

Se observa la existencia de 9 tipos de dímeros (**Figura 1c**). Los cálculos DFT muestran que los dímeros **A** y **C** poseen una mayor energía de interacción, aunque existe una contribución entrópica significativa en su formación que favorece al dímero tipo **A**. Los resultados de DM revelan que, a los pocos nanosegundos, las moléculas de AM se aglomeran completamente, formando dos fases. Se verifica un promedio de 400 puentes de hidrógeno (PH) y se observa la formación estable de varios dímeros obtenidos por cálculos DFT. Sin embargo, prevalecen los agregados formados por interacciones de apilamiento. En conclusión, nuestros resultados muestran que, a pesar de su elevada capacidad para formar PH, las interacciones de apilamiento  $\pi$ - $\pi$  dominan el auto-ensamblado inicial de la AM en medio acuoso.

(1) Petelski, A.N.; Fonseca Guerra C., *ChemistryOpen*, 2019, 8, 135-142