

XXIII SINAQO

LIBRO DE RESUMENES



*Simposio Nacional de
Química Orgánica
Córdoba, 2021*



**SOCIEDAD ARGENTINA DE INVESTIGACIÓN
EN QUÍMICA ORGÁNICA**



**SIMPOSIO NACIONAL DE QUÍMICA ORGÁNICA
CÓRDOBA - ARGENTINA 2021**

XXIII SIMPOSIO NACIONAL DE QUÍMICA

Libro de Resúmenes del XXIII Simposio Nacional de Química Orgánica

Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica

Córdoba, Argentina, Noviembre de 2021

Diseño, compilación, diagramación, compaginación y edición: Silvia Soria Castro, Natalia Pacioni, Juan Pablo Colomer y Liliana B. Jimenez.

Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica-SAIQO
XXIII Simposio Nacional de Química Orgánica / compilación - 1a ed. - Córdoba, 2021.
Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online
ISBN 978-987-88-2352-2

1. Química Orgánica. I. Colomer, Juan Pablo, comp. II. Título.
CDD 547.001

ISBN 978-987-88-2352-2



ANÁLISIS DE CAMBIOS CONFORMACIONALES DE QUITOSANO POS-REACCIÓN REDOX RADICALARIA VIA ^{13}C -CP-MAS-RMN Y DRX

Celeste Aguirre Pranzoni,¹ Guadalupe García,² Marcela Kurina-Sanz¹

¹ INTEQUI CONICET, FQByF, Universidad Nacional de San Luis, Almirante Brown 1455. ² INFAP CONICET, FQByF, Universidad Nacional de San Luis, Ej. de los Andes 950, San Luis, D5700HHW, Argentina.
pranzonica@gmail.com

FQO-86

palabras claves: Quitosano, Polimorfos, RMN de Sólidos

El estudio de la estructura conformacional y dinámica de los biopolímeros es un área de continua exploración,^a ya que arroja información para el diseño de materiales bio-inspirados y la comprensión de sus propiedades físicas. Es sabido que la espectroscopia de alta resolución de ^{13}C -RMN es utilizada como herramienta de este tipo de análisis en diferentes moléculas en solución. El corrimiento de señales del ^{13}C , a bajas temperaturas, está relacionado con isomerismos conformacionales. El uso de espectroscopia ^{13}C -RMN en estado sólido vía polarización cruzada (CP) y giro en el ángulo mágico (MAS) ha permitido obtener espectros de alta resolución, de este modo, los problemas asociados al estudio de las soluciones se lograron descartar.^b Esta técnica ha permitido complementar información estructural obtenida por difracción de rayos-X (DRX) y actualmente se posiciona como herramienta muy útil en la elucidación conformacional de varios polisacáridos.^c En esta oportunidad queremos mostrar cómo la estructura de quitosano sufre cambios conformacionales luego de experimentar una reacción de modificación redox-radicalaria con ácido benzoico en fase heterogénea (fig.1). Para ello, complementamos el uso de RMN en solución y en estado sólido (^{13}C RMN y ^{13}C CP-MAS-RMN) con estudios de DRX y FTIR. Con esto pudimos inferir acerca del cambio de polimorfo que adquirió quitosano, pos-reacción al esterificar el OH- de la posición 3. Esto es debido a que este polisacárido responde a una estructura de fibras antiparalelas que adoptan una forma helicoidal “zig-zag” estabilizada principalmente por puentes de hidrógeno entre O-5 y HO-3 (fig.1). Su nuevo polimorfo helicoidal “relajado” fue responsable de la mayor solubilidad en agua a pH neutro observada en nuestros experimentos.

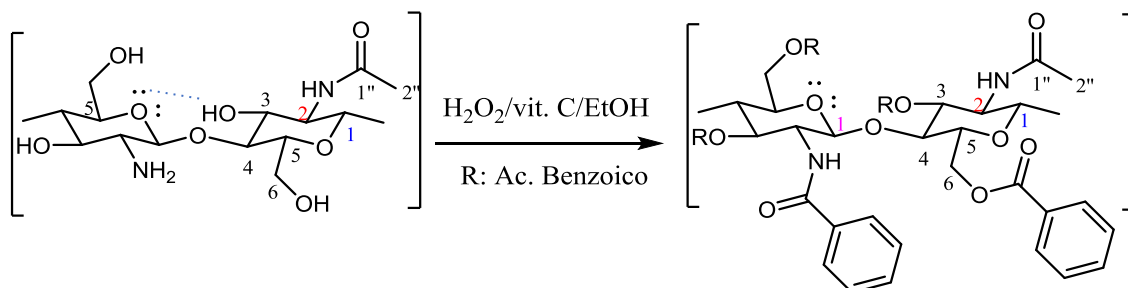


Figura 1. Estructura molecular de quitosano y reacción redox-radicalaria con ac. benzoico.

Referencias:

- a-Gosh, M.; Sadhukhan, S; Dey, K-K. *Solid State Nuclear Magnetic Resonance*, **2019**, 97, 7-16.
b-Saitó, H. *Magnetic Resonance in Chemistry*, **1986**, 24, 835-852.
c- Franca, E-F.; Freitas, L-C; Lins, R-D. *Biopolymers*, **2011**, 95, 448-460.