

ANÁLISIS DE LA ADSORCIÓN DE POLIFENOLES DERIVADOS DE BIOMASA EN ZEOLITAS MICROPOROSAS.

Romero, Ojeda Gonzalo¹; Zalazar, María Fernanda¹; Duarte, Darío¹; Angelina, Emilio¹ y Peruchena, Nélide¹.

¹Laboratorio de Estructura Molecular y Propiedades (LEMyP) – Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA, CONICET-UNNE). Avenida Libertad 5470 (3400). Corrientes, Argentina.

mfzalazar@conicet.gov.ar

Introducción: Dentro de los compuestos silíceos, las zeolitas se presentan como materiales potenciales para la adsorción de compuestos derivados de biomasa debido a sus propiedades fisicoquímicas como escasa toxicidad, estabilidad térmica, gran área superficial, intercambio iónico excepcional, capacidad de adsorción de iones y moléculas orgánicas. Estudios previos mostraron la potencial aplicación de la zeolita Beta comparada con adsorbentes comerciales para adsorber polifenoles presentes en extractos acuosos de semillas de trigo y canola, siendo adsorbentes prometedores para el desarrollo de nuevos procesos para aislar estos compuestos de recursos renovables,[1] así como en la recuperación selectiva de los mismos de aguas residuales de la industria alimentaria.[2] Se ha estudiado también el potencial de la zeolitas naturales como portadores de fármacos, específicamente en la microencapsulación de extractos ricos en catequinas y la posterior capacidad de liberación in vitro del sistema compuesto polifenol-material silíceo.[3] En este trabajo se estudia mediante cálculos DFT, la adsorción sobre zeolitas microporosas de polifenoles (PFs) elegidos en base a su presencia y/o abundancia en materias primas regionales del NEA. Inicialmente, se estudiaron descriptores claves y características electrónicas de los PFs seleccionados con el fin de predecir la interacción más favorable con el sitio activo, y luego se exploraron diferentes escenarios de adsorción en zeolitas de diferente composición química, tamaño y morfología de sus canales internos (BEA, FAU y MOR), con el fin de proponer su uso para la adsorción y aislamiento de los mismos. Los cálculos se realizaron con el programa Gaussian16 y el método ONIOM de dos capas a nivel M06-2X/6-31+G(d,p):PM6. **Resultados y Conclusiones:** Los cálculos de estructura electrónica revelan la disposición espacial óptima de los polifenoles en los canales y cavidades de las zeolitas seleccionadas. Las energías de adsorción encontradas indican que el proceso es favorable y la misma se puede relacionar con las interacciones entre las moléculas huésped y el adsorbato. Estos resultados preliminares confirman la posibilidad de utilizar zeolitas microporosas para la adsorción de polifenoles presentes en biomasa regional.

Referencias:

- 1) Thiel, A., Tippkötter, N., Suck, K., Sohling, U., Ruf, F., Ulber, R., *Eng. Life Sci.*, **2013**, 13, 239-246.
- 2) Hellwig, V., Gasser, J., *Phytochem. Rev.* **2020**, 19, 1539-1546.
- 3) Yaneva, Z., Ivanova, D., Popov, N., *Molecules* **2021**, 26, 1655.