

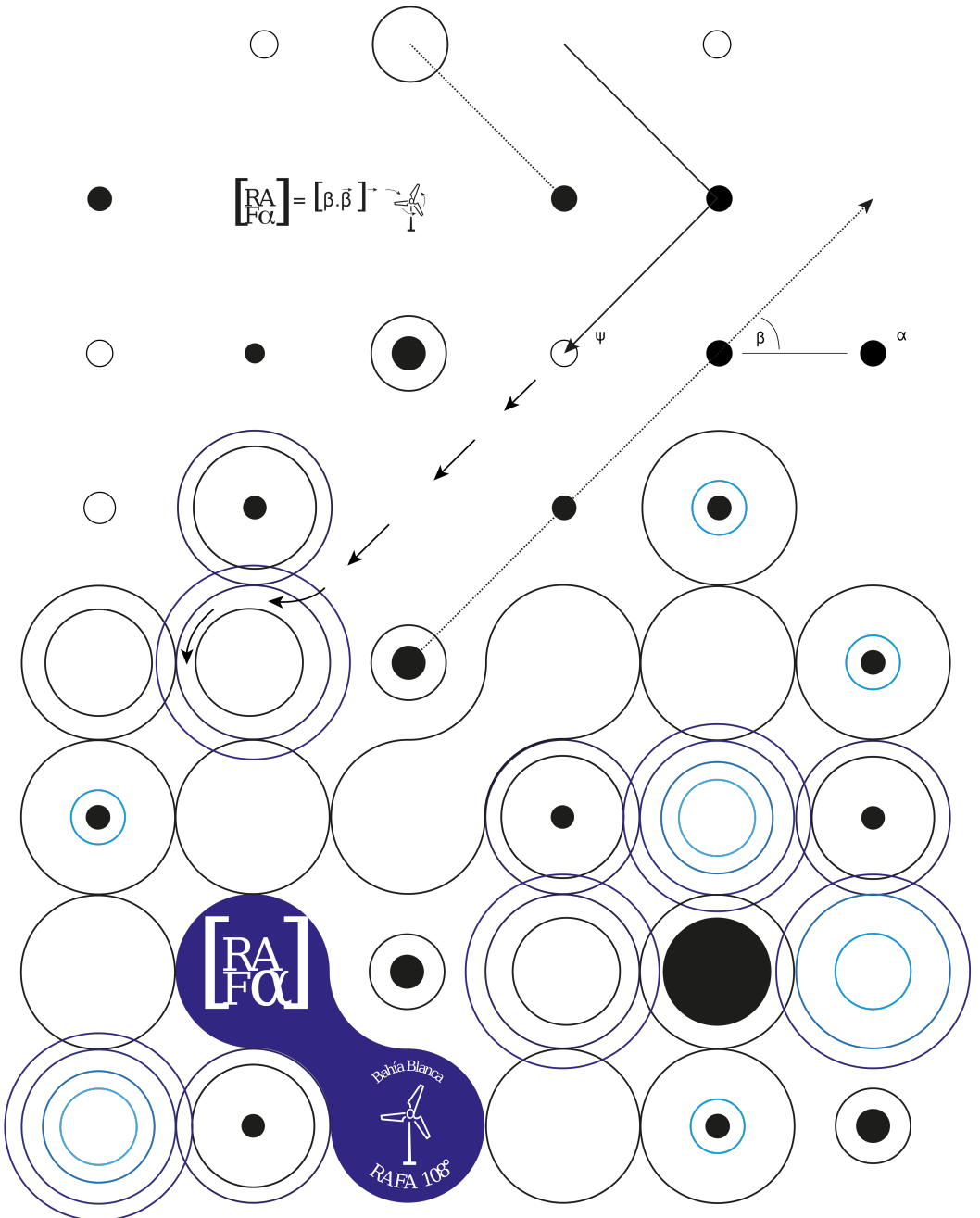


108°

Reunión  
Asociación  
Física  
Argentina

Libro de resúmenes

2023  
Bahía Blanca



gunda etapa a implementar estos cálculos para el sistema compuesto OTC.HCl:NAC, el cual representa un desafío por el número de átomos intervinientes. El objetivo es dilucidar el tipo de interacción entre las moléculas componentes y comparar con resultados experimentales previos que determinaban un tipo de interacción [3].

Los valores obtenidos mediante los cálculos numéricos son validados con los corrimientos químicos experimentales para obtener las configuraciones más probables, más allá de los valores energéticos que muchas veces no es un parámetro altamente sensible a cambios en configuración en sistemas grandes. A su vez comparamos con los espectros experimentales de InfraRojo. La comparación entre desplazamientos químicos de RMN y los obtenidos con métodos numéricos dentro de la teoría de Funcional Densidad es parte de un proyecto que promete ser una herramienta valiosa a la hora de analizar estructuras e interacciones no observables directamente por métodos experimentales.

[1] Hanwell MD, Curtis DE, Lonie D, Vandermeersch T, Zurek E, Hutchison GR; Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform, *J. of Cheminformatics* 2012, 4:17.

[2] Neese, F.; Wennmo, F.; Becker, U.; Riplinger, C. (2020) The ORCA quantum chemistry program package, *J. Chem. Phys.*, 152, 224108.

[3] A. Kokalj, Computer graphics and graphical user interfaces as tools in simulations of matter at the atomic scale, *Comp.*

[4] Bueno MS, Longhi MR, Garnero C, *Pharmaceutics* 2023, 15, 192.

Poster ID: FA-18

## **Análisis de la variación de las constantes de apantallamiento magnético de RMN en puentes salinos y enlaces de hidrógeno que estabilizan interacciones ligando-receptor y la estructura de proteínas: Un estudio comparativo analizando las contribuciones de orbitales moleculares de enlace y pares libres usando métodos cuánticos.**

Zarycz M N C<sup>1</sup>, Provasi P F<sup>2</sup>, Enriz R D<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Universidad Nacional de San Luis (UNSL), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Instituto Multidisciplinario de Investigaciones Biológicas (IMIBIO). Av. Ejército de los Andes 950, 5700 San Luis, Argentina.*

<sup>2</sup> *Universidad Nacional del Nordeste (UNNE), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura. Av. Libertad 5460, Corrientes 3404, Argentina.*

Los enlaces de hidrógeno y puentes salinos son interacciones de gran importancia debido al rol que desempeñan en la estabilización de proteínas y las interaccio-

nes ligando-proteínas, las cuales incluyen interacciones droga-receptor en sistemas biológicos y de interés farmacológico. En particular, los puentes salinos son interacciones muy fuertes que implican uno o más enlaces de hidrógeno iónico que se forman entre grupos ionizables con carga opuesta, más frecuentemente entre las cadenas laterales cargadas negativamente de los aminoácidos aspartato y glutamato (Asp- y Glu-) y grupos amino con carga positiva pertenecientes a las cadenas laterales de arginina, lisina o histidina (Arg+, Lys+ o Hys+), o a agonistas de receptores naturales, tales como los neurotransmisores dopamina, serotonina o norepinefrina, por ejemplo. [1-4] Aunque se han logrado avances significativos, la predicción y el modelado con precisión de los puentes salinos representan un desafío. Debido a que los aminoácidos ácidos implicados se encuentran en su forma desprotonada, mientras que los grupos amino están protonados, los puentes salinos existen en medio acuoso, mientras que en estado gaseoso se transforman en enlaces de hidrógeno neutros.[5,6] Es decir, el efecto del solvente es un factor determinante en este tipo de interacciones. Una de las técnicas espectroscópicas utilizadas para caracterizar este tipo de interacciones es la RMN de los átomos involucrados en solución[7-8]. Los valores de los apantallamientos magnéticos nucleares de los átomos de nitrógeno y de hidrógeno permiten diferenciar la presencia de un enlace de hidrógeno o de un puente salino, así como estimar la fortaleza de los mismos. En este trabajo presentaremos resultados correspondientes a una investigación donde evaluamos con métodos de la teoría de la funcional de la densidad (DFT), usando orbitales moleculares localizados, el origen electrónico de los apantallamientos magnéticos nucleares de átomos de hidrógeno y nitrógeno pertenecientes a puentes salinos formados por los residuos Asp, Glu, Arg, Lys, His en sus formas ionizadas. En este estudio también se busca comprender cuáles son las contribuciones electrónicas que determinan las marcadas diferencias que se observan en los valores de las propiedades de RMN de puentes salinos y enlaces de hidrógeno en los que participan átomos similares. La aplicación de esta metodología, que implica el análisis de las propiedades de RMN en términos de los enlaces y pares libres, aporta información original que permite dilucidar el tipo de contribuciones electrónicas que dan lugar a la aparición de las propiedades de RMN antes mencionadas.[9] Las geometrías de los sistemas estudiados se optimizaron a nivel DFT/ B3LYP-D3(BJ)/6-311++G(d,p) [10], mientras que el efecto del solvente, considerando una solución acuosa, se tuvo en cuenta usando la aproximación IEF-PCM[11]. Los apantallamientos magnéticos se calcularon usando las funcionales B3LYP y KT3 con las bases aug-cc-pVTZ y cc-pVTZ. Referencias [1] JE Donald, DW Kulp, WF DeGrado. *Proteins*, 79, 898, 2011. [2] MC Ahmed , E Papaleo , K Lindorff-Larsen. *PeerJ* 6, e4967, 2018. [3] PI Nagy and PW Erhardt. *Phys. Chem. B*. 116, 18, 5425, 2012. [4] RD Tosso, MNC Zarycz, MA. Schiel, L Goicochea Moro, HA Baldoni, E Angelina, and R. D. Enriz. *J. Comput. Chem.* 43,

1298, 2022. [5] PJ Silva, MAS Perez, NF Brás, PA Fernandes, M.J. Ramos, *Theor. Chem. Acc.*, 131, 1179, 2012. [6] PI Nagy. *Int. J. Mol. Sci.* 15, 19562, 2014. [7] JH Tomlinson, S Ullah, PE Hansen, MP Williamson. *JACS* 131, 4674, 2009. [8] MP Williamson, AM Hounslow, J Ford, K Fowler, M Hebditch, PE Hansen. *Chem. Commun.* 49, 9824, 2013. [9] MNC Zarycz, PF Provasi. *Magn. Reson. Chem.* 53, 120, 2015. [10] S Grimme, S Ehrlich, and L Goerigk. *J. Comput. Chem.* 32, 1456, 2011. [11] J Tomasi, B Mennucci, R Cammi. *Chem. Rev.* 105, 2999, 2005.

Poster ID: FA-19

## Identificación mediante XPS de especies funcionales de oxígeno en óxidos de grafeno reducidos por diferentes vías

Bandel S<sup>1</sup>, Iribarren J I<sup>1</sup>, Álvarez J A<sup>1</sup>, Donadelli J A<sup>1 3</sup>, Devida J M<sup>2</sup>, Requejo F G<sup>1 2</sup>

<sup>1</sup> *Facultad de Ciencias Exactas (FCE), C. 115 s/n, B1900 La Plata, Provincia de Buenos Aires*

<sup>2</sup> *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Universidad Nacional de La Plata - CONICET. Diagonal 113, B1900 La Plata, Provincia de Buenos Aires*

<sup>3</sup> *Empresa de Investigación y desarrollo para la industria energética (Y-TEC), Av. del Petroleo Argentino 900-1198, Berisso, Provincia de Buenos Aires*

Las películas delgadas de óxido de grafeno (GO) son en general aislantes por la interrupción de la red grafitica de carbono  $sp^2$ . La conductividad del GO disminuye con el aumento de grupos funcionales oxigenados enlazados químicamente a la red grafitica, como hidroxilos, carbonilos, entre otros [1]. Dichos grupos representan una barrera para el transporte eléctrico y a su vez representan sitios reactivos que aportan funcionalidad al GO (i.e. inmovilización enzimática). Con el propósito de remover los grupos funcionales oxigenados es posible reducir el GO mediante diferentes vías para obtener óxido de grafeno reducido (rGO). Este proceso permite una disminución de las propiedades aislantes propias del GO hasta varios órdenes de magnitud, transformando al material en un semiconductor y, en última instancia, en un conductor con valores importantes de conductividad cercanas a las del grafito [2].

En este trabajo se exploran las características químicas superficiales de materiales de grafeno, en particular GO y rGO obtenido por diferentes métodos. Mediante XPS se caracteriza el tipo y abundancia de las diferentes especies de oxígeno ligadas a la red grafitica [3]. Se busca así evaluar además las características del rGO obtenido por diferentes métodos, comparándolos con el GO inicial antes de la reducción en cada caso.

[1] Bielawski, C. W., Dreyer, D. R., Park, S., y Ruoff, R. S. (2010). The chemistry of graphene oxide. *Chem. Soc. Rev.* 39(1), 228-240.