

Respuesta fotofísica y cambios morfológicos inducidos por el solvente en agregados de un resorcinareno

M. Virginia Sosa¹; Hussain Kashif²; Laura S. Gómez Velázquez¹; Eduardo D. Prieto^{1,3}; Ezequiel Wolcan¹

¹ Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, UNLP, CCT La Plata-CONICET), La Plata, Argentina.

² H.E.J. Research Institute of Chemistry, International Center for Chemical and Biological Sciences, University of Karachi, Karachi, Pakistan.

³ Departamento de Cs. Biológicas, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP), Instituto Ciencias de la Salud, Universidad Nacional Arturo Jauretche (UNAJ), Florencio Varela, Argentina.

virginiasosa@quimica.unlp.edu.ar

Área temática: B. Autoensamblado

La capacidad de los macrociclos anfífilos para autoensamblarse en estructuras como micelas, vesículas o bicapas depende críticamente del balance de interacciones hidrofóbicas, puentes de hidrógeno y la polaridad del solvente.¹ En este estudio, se exploró la relación entre la morfología de los agregados y las propiedades ópticas de un nuevo compuesto derivado de un calix[4]resorcinareno en mezclas de THF/agua. El compuesto, denominado C3, se caracteriza por poseer cadenas alquílicas de 12 carbonos y ocho grupos hidrofílicos $-\text{CH}_2\text{COOH}$ en su cabeza superior.

Mediante Dispersión Dinámica de Luz (DLS) y Microscopía de Fuerza Atómica (AFM), se confirmó la formación de ensamblajes supramoleculares cuya distribución de tamaño y forma evolucionan significativamente con la composición del solvente. Los resultados de DLS muestran una alta heterogeneidad estructural en contenidos intermedios de agua, con la presencia de agregados grandes y polidispersos. En el extremo de alta fracción de agua, el sistema converge hacia la formación de agregados micelares estables y definidos con un tamaño aproximado de 100 nm. Por su parte, las imágenes de AFM permitieron visualizar la transición desde agregados laxamente asociados en medios ricos en THF hacia estructuras mucho más compactas a medida que se incrementa la cantidad de agua.

Esta evolución morfológica se correlacionó con cambios drásticos en la respuesta fotofísica del sistema. Mientras que la asociación molecular suele conducir a la extinción de la fluorescencia por contacto (ACQ), en el caso de C3, la reorganización estructural hacia estados más compactos induce cambios en las transiciones electrónicas detectadas por espectroscopía de absorción y matrices de emisión. La evidencia combinada sugiere que el camino de agregación de C3 es fundamentalmente distinto al de análogos con cadenas más largas^{2,3}, caracterizándose por una reorganización progresiva de aglomerados preexistentes hacia ensamblajes supramoleculares definidos, controlados estrictamente por la composición del entorno de solvatación.

REFERENCIAS

1. E. Weiland, et al., PCCP 25 (2023) 21916-21934
2. M. V. Sosa, et al., PCCP 26 (2024) 11933-11944
3. M. V. Sosa, et al., PCCP 27 (2025) 1041-1054