

El agua como modulador de la fotofísica de un resorcinareno

M. Virginia Sosa¹; Hussain Kashif²; Federico A. O. Rasse-Suriani¹; Fernando S. García Einschlag¹;
Ezequiel Wolcan¹

¹ Instituto de Investigaciones Físicoquímicas 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

virginiasosa@quimica.unlp.edu.ar

Área temática: B. Autoensamblado

El autoensamblaje de macrociclos anfífilos en solución es un área de gran interés para el desarrollo de materiales nanoestructurados y sistemas de reconocimiento molecular.¹ En este trabajo, se investigó el comportamiento fotofísico de un nuevo compuesto derivado de un calix[4]resorcinareno, denominado C3, caracterizado por poseer cadenas alquílicas de 12 carbonos y ocho grupos hidrofílicos $-\text{CH}_2\text{COOH}$ en su cabeza superior. Esta estructura molecular, que difiere de análogos reportados previamente,^{2,3} otorga al sistema una marcada anfifilicidad y una elevada capacidad de interactuar mediante puentes de hidrógeno.

El estudio se centró en la respuesta del sistema en mezclas de solventes THF/agua de composición variable. Dada la complejidad de las señales espectrales, se empleó el análisis multivariado utilizando Análisis de Componentes Principales (PCA) sobre las matrices de absorción y la técnica de Matrices de Excitación-Emisión (EEM) combinada con el Análisis de Factores Paralelos (PARAFAC).

El análisis de absorción reveló regímenes de agregación dependientes del solvente: en mezclas con bajo contenido de agua (0-47%), el sistema se mantiene en un estado bien solvatado mientras que por encima del 53% de agua se observa un cambio abrupto en las transiciones electrónicas dominantes y en los patrones de agregación.

La aplicación de PARAFAC permitió identificar dos factores emisivos distintos asociados a diferentes organizaciones supramoleculares de los cromóforos. Las contribuciones relativas de estos factores varían de forma cooperativa con la fracción de agua, evidenciando una reorganización estructural de los agregados a medida que aumenta la polaridad del medio.

Estos resultados demuestran que el comportamiento fotofísico de C3 está gobernado por una transición entre dos estados de agregación distintos, proporcionando información clave sobre cómo las modificaciones estructurales en resorcinarenos influyen en su respuesta óptica controlada por el solvente.

REFERENCIAS

1. K. Stefańska, et al., *JOC* 81 (2016) 6018-6025
2. M. V. Sosa, et al., *PCCP* 26 (2024) 11933-11944
3. M. V. Sosa, et al., *PCCP* 27 (2025) 1041-1054