



ESTUDIO DE MIGRACIÓN DE SONDAS SOLVATOCRÓMICAS EN UN SISTEMA MICELAR, MEDIANTE SIMULACIÓN DE DINÁMICA MOLECULAR

LUIS BRIONES MONTECINOS
INGENIERO EN BIOINFORMÁTICA

RESUMEN

Cálculos de dinámica molecular fueron utilizadas para simular sistemas constituidos de una betaína solvatocrómica en una solución acuosa de un copolímero de tipo A-BA (“poloxámero”) formado por bloques de polietilenoxi (PEO) y polipropilenoxi (PPO), de fórmula (PEO)₁₁-(PPO)₁₆-(PEO)₁₁ (Stuart y col., 2009). Tres betaínas fueron estudiadas en presencia de este copolímero, la N-metil-2,4-difenil-6-(4-oxifenil)piridinio (1a), la N-octil-2,4-difenil-6-(4-oxifenil)piridinio (1b) y la N-(3,5-difenil-4-oxi)fenil-2,4,6-trifenilpiridinio (ET(30) de Reichardt) (2). Los resultados teóricos fueron comparados con el comportamiento espectral de estos compuestos solvatocrómicos en presencia de algunos poloxámeros. La diferencia en la respuesta espectral del par de betaínas 1a-b se había racionalizado en base a los diferentes grados de inserción de estas sondas dentro del núcleo hidrofóbico micelar. Esta interpretación fue ratificada por los resultados de las simulaciones teóricas, las cuales demostraron que las sondas con un nivel mayor de lipofilia penetran más profundamente dentro de la cavidad hidrofóbica de la micela con respecto a las sondas con un nivel menor de lipofilia. En lo que se refiere a la betaína de Reichardt, evidencias espectrales habían sugerido la existencia de dos microambientes distintos para esta sonda, uno originado de la interacción de 2 con unímeros aislados en solución, y el otro correspondiendo al interior más hidrofóbico de la micela formada por varios unímeros (Anexo 10.2). La simulación de estos sistemas permitió definir más claramente estos ambientes y estimar el grado de solvatación acuosa de 2 dentro de la micela polimérica.

ABSTRACT

Molecular dynamics calculations were employed to mimic systems comprising an aqueous solution of a solvatochromic betaine in the presence of a copolymer of the type A-B-A ("poloxamers"), formed of a polyethyleneoxy (PEO) and a polypropyleneoxy (PPO) block, with the formula (PEO)₁₁-(PPO)₁₆-(PEO)₁₁ (Stuart et al.,2009). Three betaines were studied in the presence of this copolymer, the N-methyl- 2,4-diphenyl-6-(4-oxyphenyl)pyridinium (1a), the N-octyl-2,4-diphenyl-6-(4- oxyphenyl)pyridinium (1b) and the N-(3,5-diphenyl-4-oxyphenyl)-2,4,6- triphenylpyridinium (Reichardt's ET(30) dye) (2). The theoretical results were compared with the spectral behaviour of these solvatochromic compounds in the presence of some poloxamers. The differences in the spectral responses of the betaine pair 1a-b had been rationalized as arising from the different degrees of insertion of these probes inside the hydrophobic micellar nucleus. This interpretation found support in the results of the theoretical simulations, which showed that the probe with the greater lipophilicity was more deeply buried inside the hydrophobic cavity of the micelle than that with a smaller lipophilicity. As for Reichardt's betaine, spectral evidences had suggested the existence of two different microenvironments for this probe, one originating from the interaction of 2 with isolated unimers in solution, and the other corresponding to the more hydrophobic micellar core, formed by aggregation of several unimers (Anexo 10.2). The simulation of these systems yielded a clearer picture of these environments, and allowed the estimation of the aqueous solvation of 2 inside the polymeric micelle.