



**Congreso Argentino de Fisicoquímica y
Química Inorgánica - La Plata 2021**



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

ESTUDIANDO LA INTERACCIÓN DE FTALOCIANINAS DE ZINC CON BICAPAS DE DMPC A TRAVÉS DEL MODELADO MOLECULAR

Gorod Noelia S.¹, Miretti Mariana², Tempesti Tomas C.¹, Baumgartner Maria T.¹ y Puiatti Marcelo¹.

1 Instituto de Investigaciones en Físico-Química de Córdoba (INFIQC), Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina. **2** Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.

ngorod@unc.edu.ar

Introducción Las Ftalocianinas de Zinc (ZnPc) son importantes agentes utilizados en Terapia Fotodinámica (PDT).^[1] Entre sus propiedades se destacan su alto rendimiento cuántico de generación oxígeno singlete y longitud de onda de excitación por sobre 630 nm, lo que permite mayor penetración radiativa en los tejidos. En contraparte, su baja solubilidad en agua y agregación en solución pueden generar problemas de biodisponibilidad y administración. Para salvar estas dificultades se han ideado nuevas generaciones de agentes, vehiculizando ZnPc con liposomas, polímeros, nanopartículas, etc.^[1] En nuestro grupo se han empleado exitosamente ZnPc vehiculizadas en liposomas para PDT en células de Glioblastoma^[2] y cepas de Tuberculosis Multirresistente.^[3] Para entender la interacción entre distintas ZnPc y liposomas de DMPC se llevaron a cabo estudios de dinámica molecular.

Resultados Se realizaron dinámicas libres y *Umbrella Sampling (US)* fuera del equilibrio. Las simulaciones libres muestran que ZnPc neutras ingresan a la bicapa y se mantienen dentro de la misma interaccionando con las cadenas hidrofóbicas de los lípidos. Por otra parte, las ZnPc que poseen carga positiva se depositan sobre la superficie de la bicapa interaccionando con las cabezas polares de los lípidos que la conforman. Los perfiles de energía libre (ΔG) obtenidos a partir de simulaciones *US* muestran un mínimo en el interior de la bicapa, para el ingreso de las ZnPc neutras, complementando los resultados de simulaciones libres. Este modelo además muestra que la inserción en membrana es más favorable que la agregación en solución.

Conclusiones El modelo empleado muestra que las ZnPc estudiadas presentan una energía de interacción favorable con distintas zonas de la bicapa lipídica, dependiendo de su carga total. Es necesario estudiar otros efectos (estructurales, orientación, etc) en estos sistemas y así proponer nuevos agentes de esta familia que puedan incluirse favorablemente en liposomas para ser utilizados en PDT.

Referencias

- 1) L. P. Roguin, N. Chiarante, M. C. García Vior, J. Marino, *Int. J. Biochem. Cell. Biol.*, **2019**, 114, 105575.
- 2) F. N. Velazquez, M. Miretti, M. T. Baumgartner, B. L. Caputto, T. C. Tempesti, C. G. Prucca. *Sci. Rep.*, **2019**, 9, 3010.
- 3) M. Miretti, L. Juri, M. C. Cosiansi, T. C. Tempesti, and M. T. Baumgartner. *Chemistry Select*, **2019**, 4, 9726–9730.