

El estudio de dinámica molecular realizado muestra que las ZnPc estudiadas presentan una energía de interacción favorable con distintas zonas de la bicapa lipídica, dependiendo de su carga total. Las ZnPc neutras ingresan a la bicapa e interaccionan con las cadenas hidrocarbonadas mientras que las cargadas positivamente interaccionan con las cabezas polares

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, Puiatti Marcelo¹
 INFIQC- Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina
 e-mail: ngorod@unc.edu.ar

INTRODUCCIÓN

Las Ftalocianinas de Zinc (ZnPc) son importantes agentes utilizados en Terapia Fotodinámica (PDT).^[1]

Entre sus propiedades podemos mencionar:

- rendimiento cuántico de generación de 1O_2 .
- $\lambda_{abs} > 630$ nm. Absorbe en la ventana fototerapéutica.
- solubilidad en agua
- agregación en solución acuosa

Para mejorar estas últimas dos propiedades se pueden vehicular ZnPcs en liposomas.^[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]

[1] L. P. Roguin, et al. *Int. J. Biochem. Cell. Biol.*, **2019**, *114*, 105575.

[2] F. N. Velazquez, et al. *Sci. Rep.*, **2019**, *9*, 3010.

[3] M. Miretti, et al. *Chemistry Select*, **2019**, *4*, 9726-9730.

METODOLOGÍA

Sistema de estudio:

Software: Gromacs 2019

128 lípidos de DMPC UA (GROMOS54a7)

Solvente: agua SPC y fuerza iónica 0,15 M

Caja de 6x6x10 Å

Parámetros de ZnPcs obtenidos de ATB

(<https://atb.uq.edu.au/>)

Dinámicas Libres:

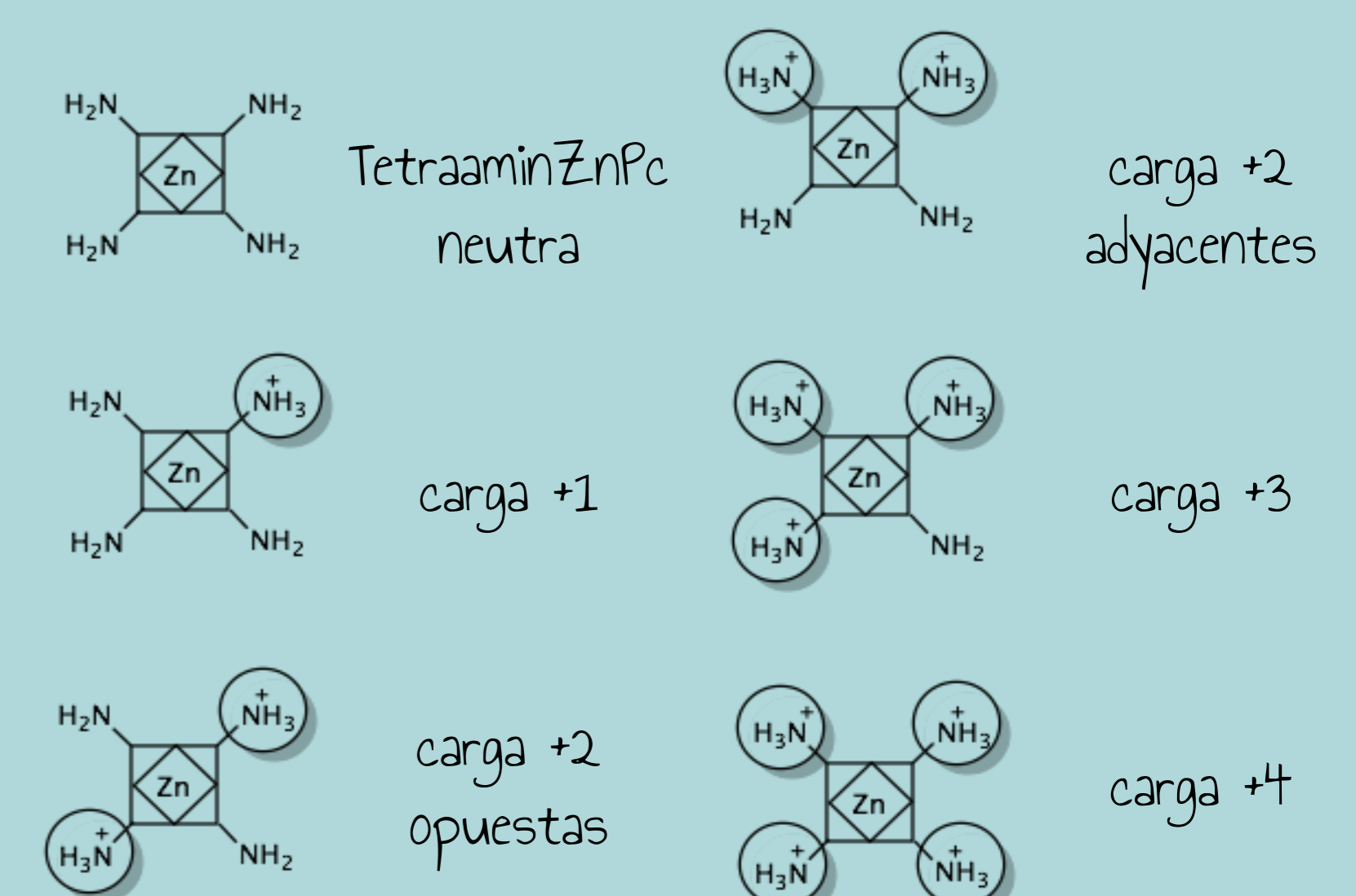
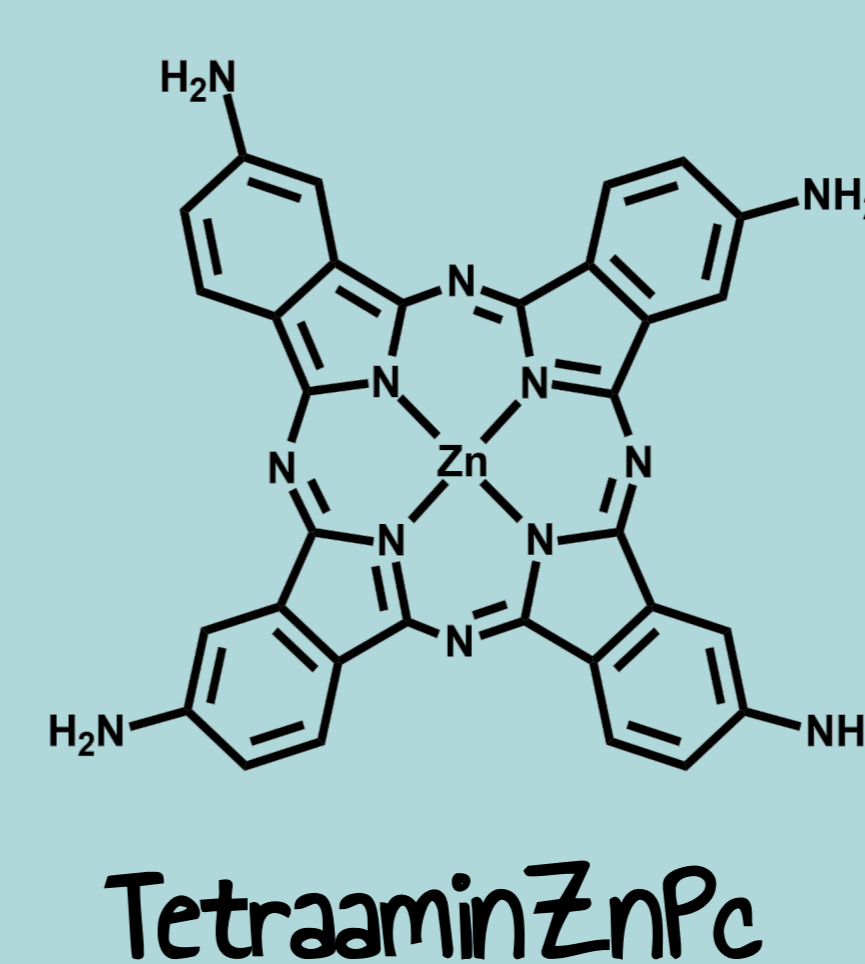
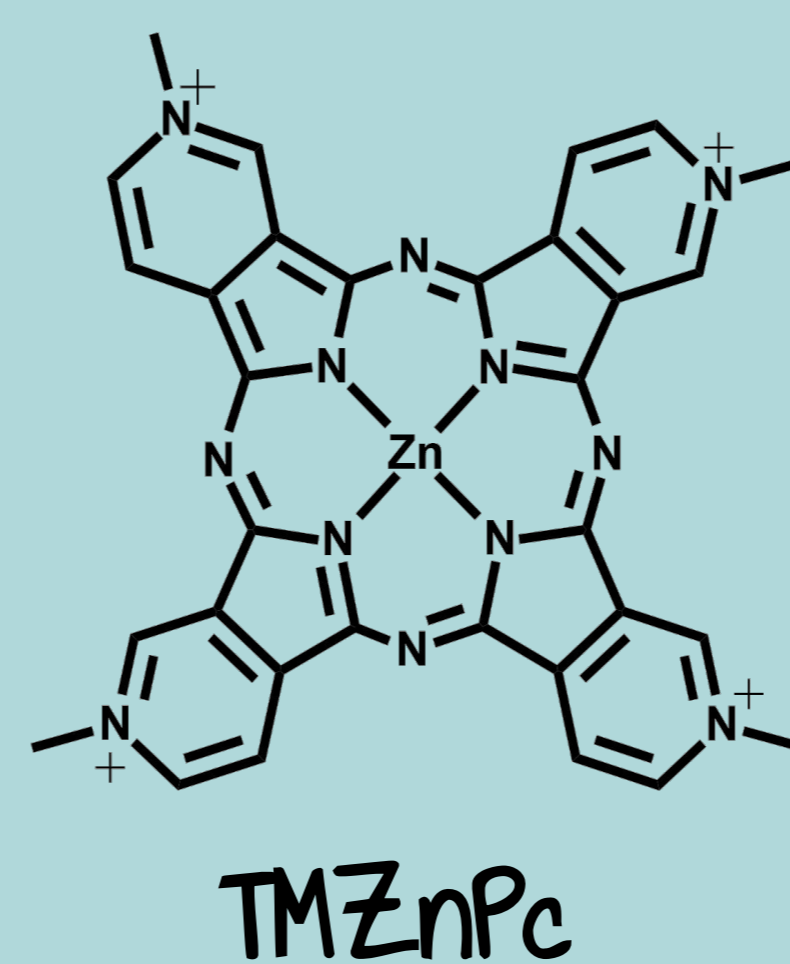
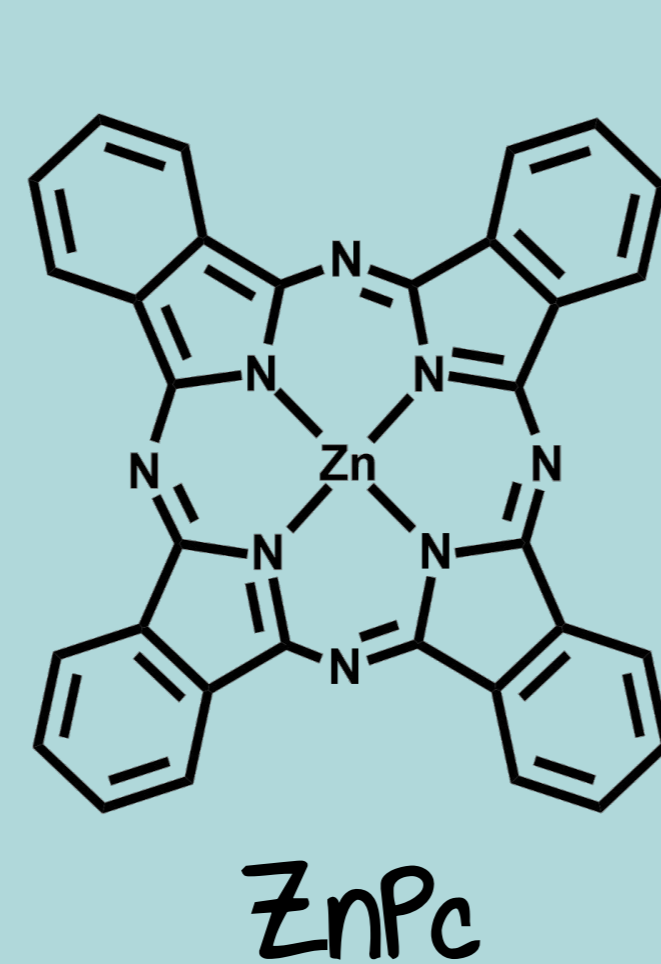
- 1) Minimización
- 2) 5 ns de equilibración NVT
- 3) 10 ns de equilibración NPT
- 4) 100 ns de producción, NPT

Umbrella Sampling:

Se realizaron 25 simulaciones de 20 ns cada una a lo largo de la trayectoria. Se generaron configuraciones iniciales guiando el centro de masa de la ZnPc a través de la bicapa.

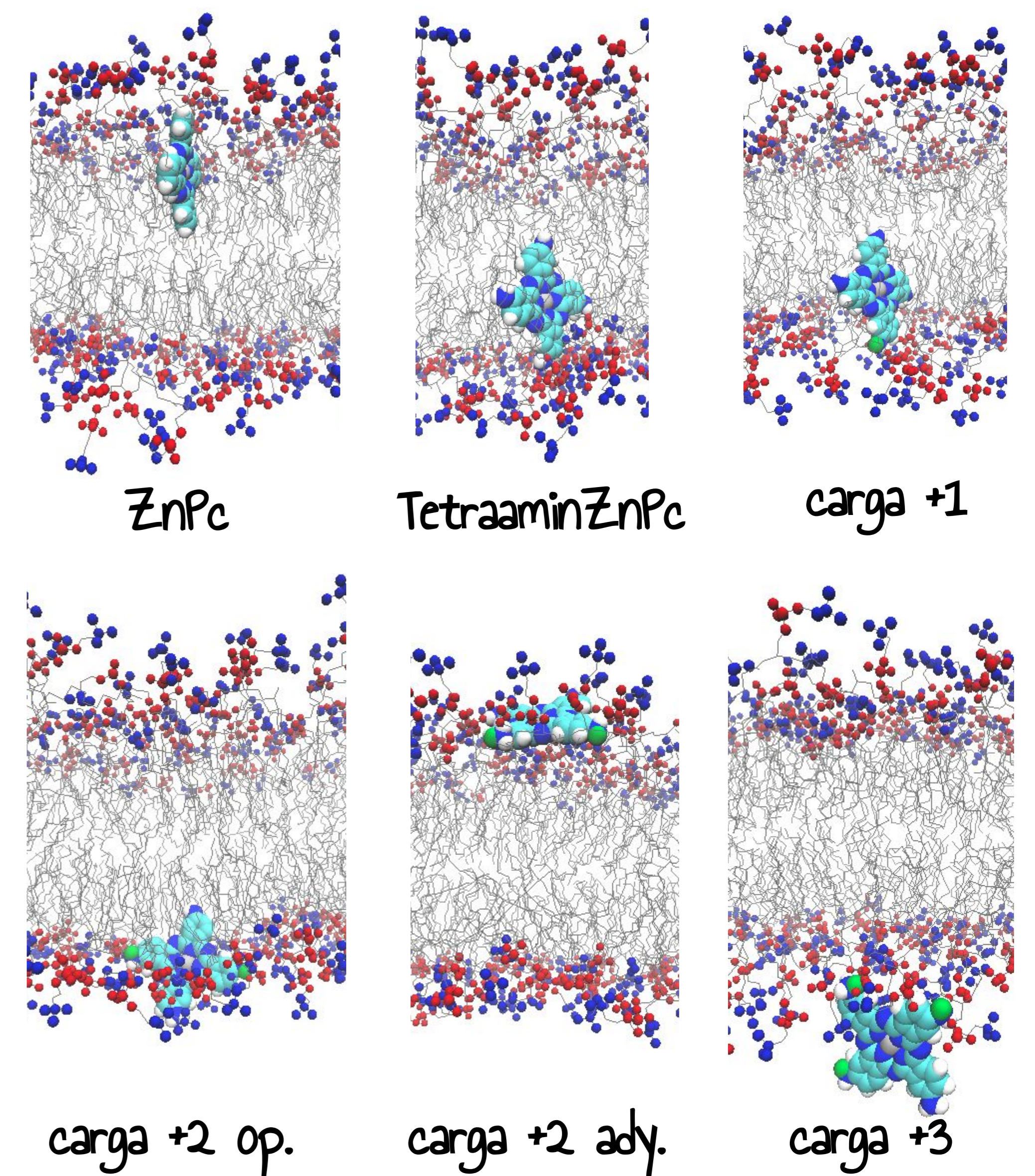
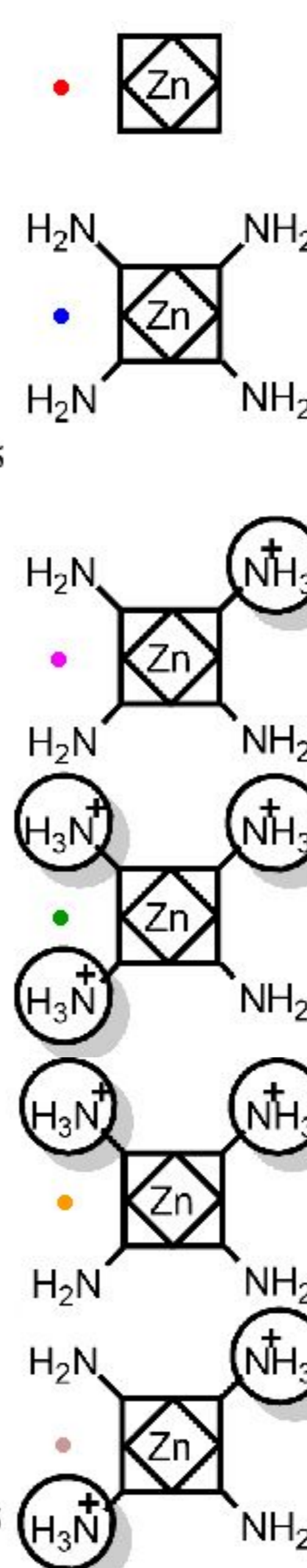
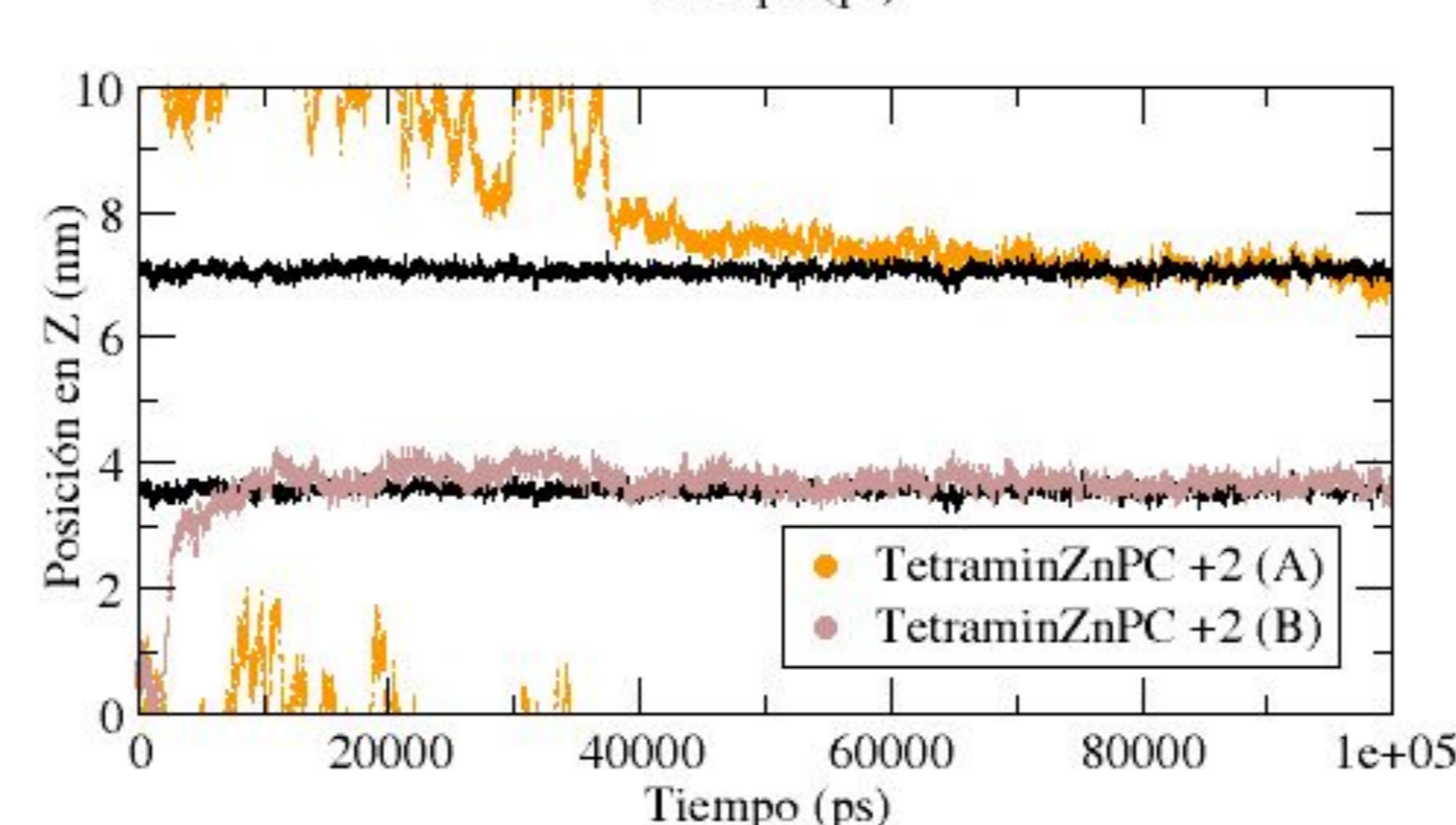
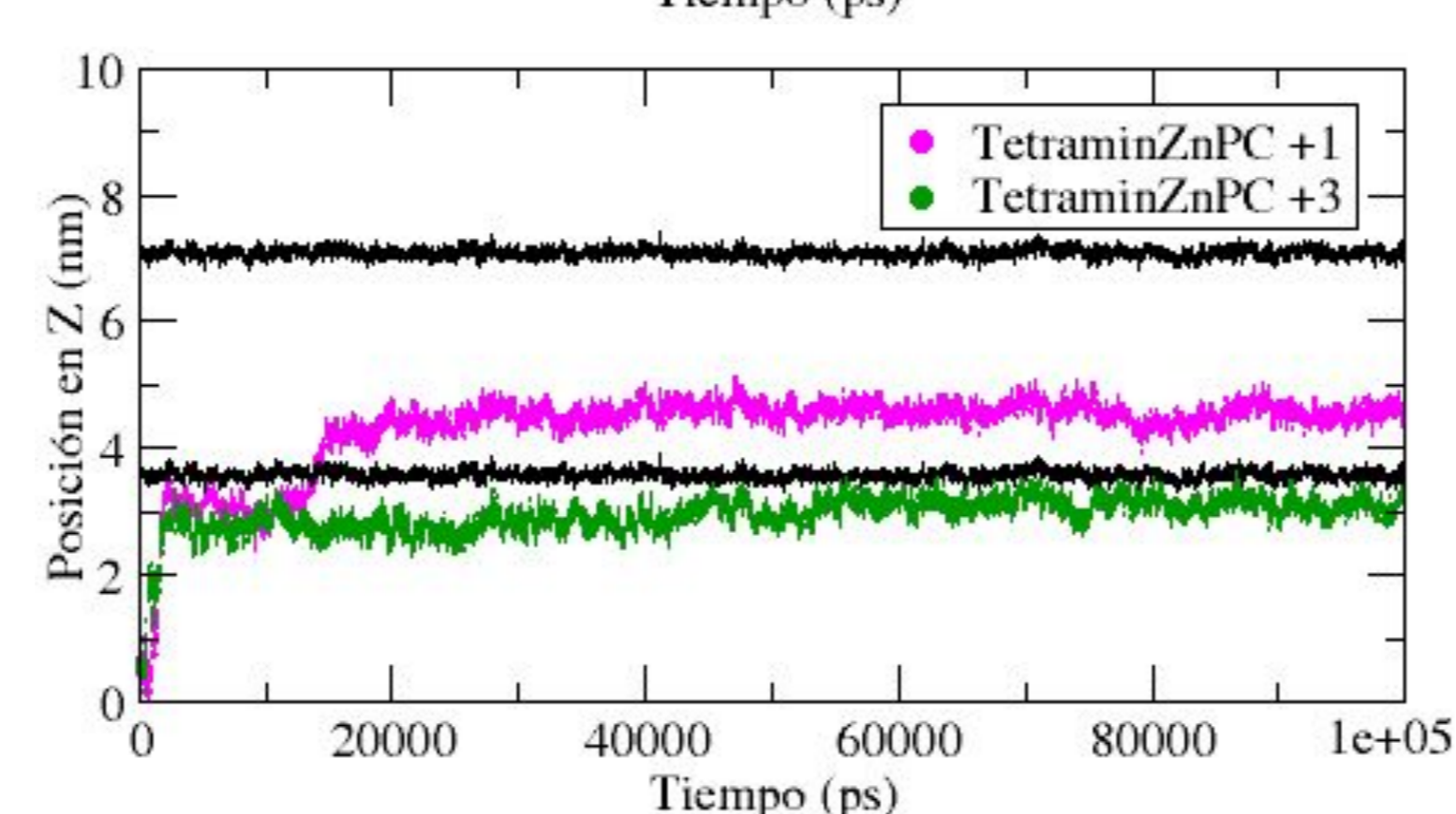
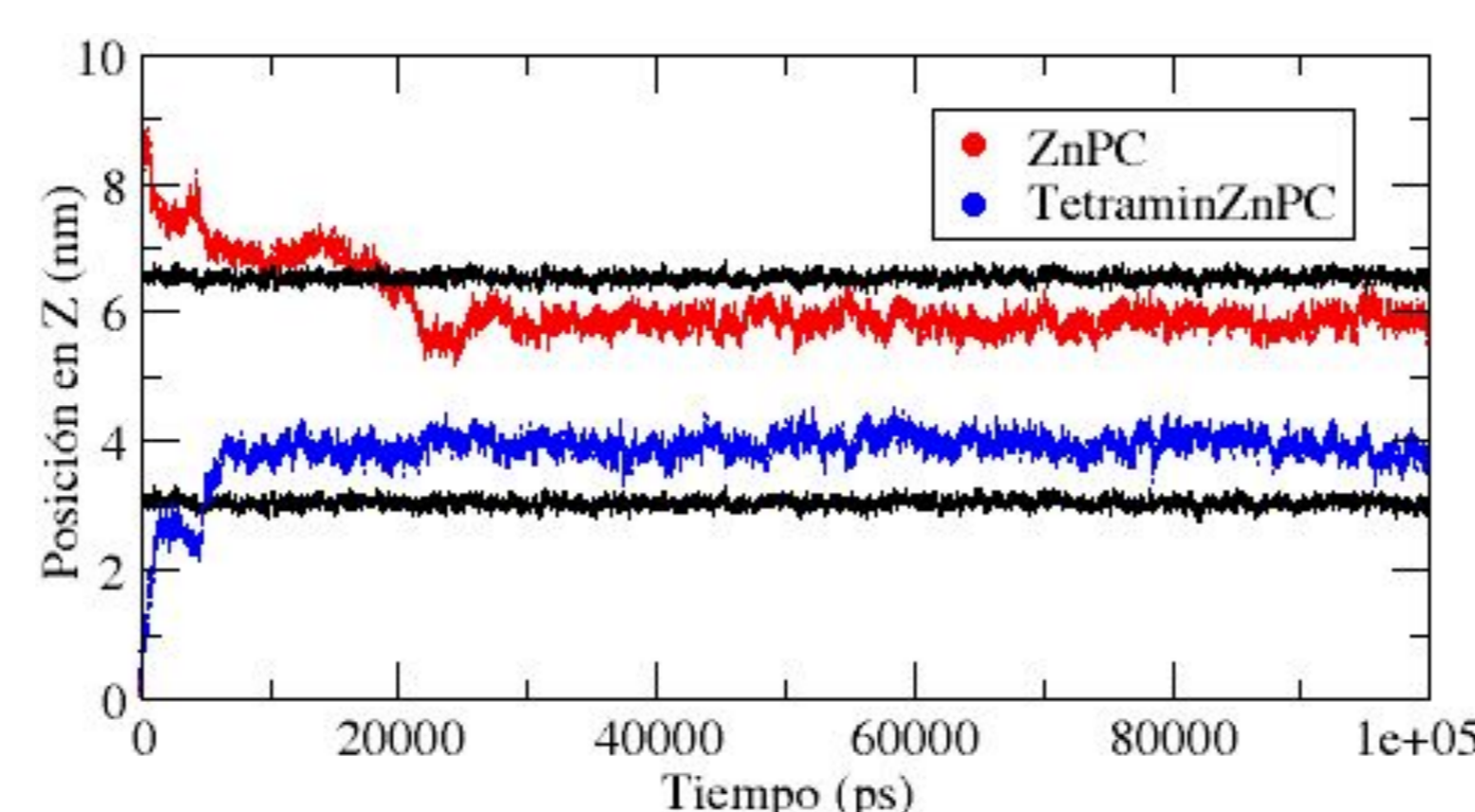
OBJETIVOS

Para entender la interacción entre distintas ZnPc y liposomas de DMPC se llevaron a cabo estudios de dinámica molecular.

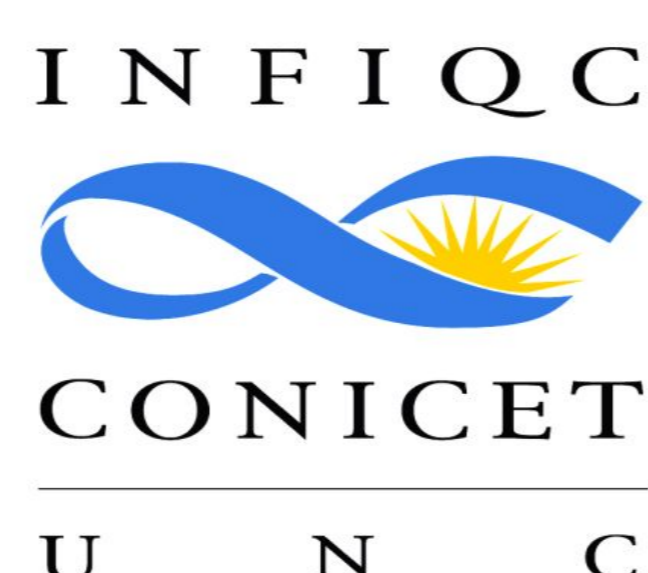
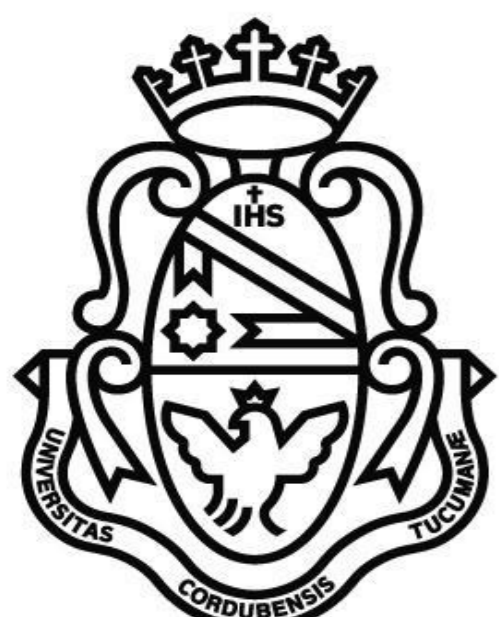
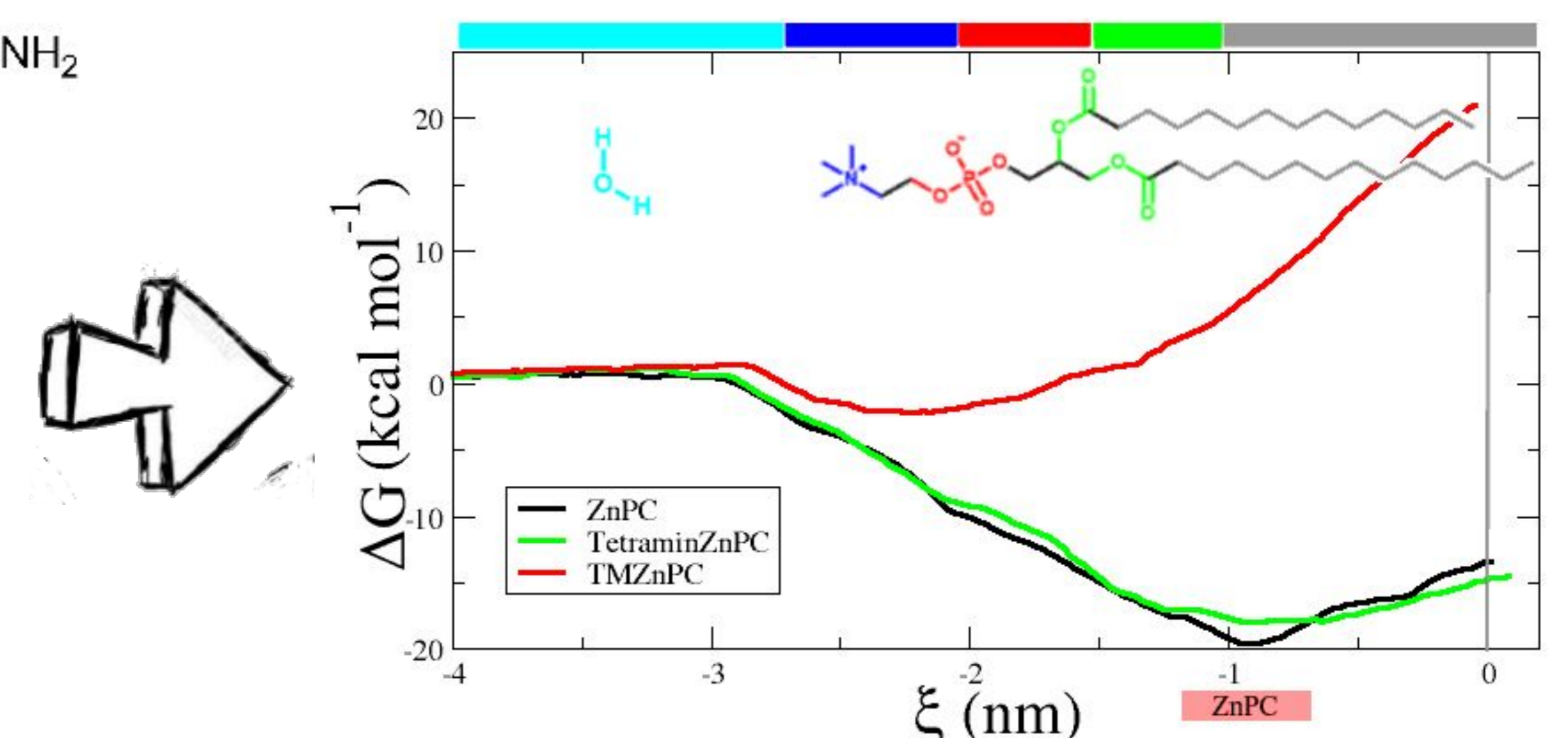


RESULTADOS

DINÁMICAS LIBRES



UMBRELLA SAMPLING PERFILES DE ENERGÍA LIBRE



Para más información y resultados
 seguí el link: [CLICK AQUÍ](#)