

## XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

### DEPENDENCIA DE LA ADSORCIÓN DE LA DACARBAZINA CON EL PH: ESTUDIO DEL FÁRMACO TRANSPORTADO EN SUPERFICIES DE CARBONO

Román Gabriel<sup>2</sup>, Díaz Compañy Andres<sup>1,2</sup> y Simonetti Sandra<sup>2,3</sup>.

<sup>1</sup> Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, Calle 526 entre 10 y 11, 1900 La Plata, Argentina

<sup>2</sup> Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.

<sup>3</sup> Universidad Tecnológica Nacional (UTN), 11 de Abril 461, B8000LMI - Bahía Blanca, Argentina.

email: ssimonet@uns.edu.ar

#### Introducción

Debido a los efectos secundarios de la mayoría de los medicamentos terapéuticos, es de vital importancia desarrollar fármacos dirigidos a las células enfermas mediante un transportador adecuado. En particular, los materiales de carbono adquieren en la actualidad un número creciente de aplicaciones como transportadores para fases activas. La característica principal de estos materiales se establece por su textura y la química de la superficie. En relación, los métodos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) pueden proporcionar detalles atomísticos de importancia. En este trabajo se estudia, mediante cálculos realizados con el programa Vienna Ab initio Simulation Package, la capacidad de la superficie de carbono prístina y funcionalizada con el grupo carboxilo (-COOH) para adsorber a las distintas especies del fármaco dacarbazina a diferente pH, y se predicen las condiciones para su liberación.

#### Resultados

Se observan interacciones débiles entre el fármaco y la superficie de carbono prístina que limitarían considerablemente la eficacia de su administración. Sin embargo, la superficie de carbono funcionalizada tiene un efecto significativo sobre la adsorción de dacarbazina a pH neutro y ácido. A bajo pH, los grupos carboxílicos (-COOH) en la superficie actúan como centro de atracción del fármaco protonado a través de enlaces hidrógeno e interacciones electrostáticas, lo que podría favorecer una liberación controlada. A pH neutro, podría esperarse un aumento en la velocidad y en la cantidad de dacarbazina liberada debido a que las interacciones electrostáticas entre la molécula neutra y el grupo carboxilo disminuyen. A pH básico, el fármaco se encuentra desprotonado y el grupo carboxílico ionizado (-COO<sup>-</sup>) por lo que presentan una repulsión electrostática más fuerte que podría aumentar la tasa de liberación del fármaco.

#### Conclusiones

Las superficies de carbono desempeñan un papel fundamental como portador, con eficacia mejorada principalmente a través de la funcionalización, y potencialmente puedan convertirse en un candidato prometedor para el transporte y entrega del fármaco dacarbazina. Consideramos que una mejor comprensión de las propiedades de adsorción de este adsorbente conducirán en el futuro a muchas más aplicaciones.