

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

### ESTUDIO DE LA SILICA PRÍSTINA Y AMINO-FUNCIONALIZADA PARA EL TRANSPORTE DE LA DROGA AMPICILINA

Noseda Grau Emilia<sup>1,2</sup>, Dodero Gabriela<sup>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](mailto:ssimonet@uns.edu.ar)

#### Introducción

Los nanoportadores de fármacos se presentan como plataformas prometedoras para portar y administrar biomoléculas, y así mejorar la eficacia terapéutica de los medicamentos. La ampicilina es un derivado de la penicilina de amplio espectro utilizado para tratar variadas infecciones bacterianas. Debido a su gran utilidad y bajo costo, la ampicilina puede utilizarse como un medicamento modelo para estudiar los procesos de adsorción de fármacos en materiales porosos como la sílica. Al respecto, los métodos DFT se han convertido en una herramienta importante para comprender el comportamiento de los materiales durante la adsorción de moléculas en superficies sólidas. En este trabajo, mediante cálculos realizados con el programa Vienna Ab initio Simulation Package, estudiamos la adsorción del fármaco ampicilina en dos planos característicos de la sílica, las superficies hidroxiladas  $\text{SiO}_2(001)$  y  $\text{SiO}_2(111)$ . Se analiza la mejora en la adsorción cuando el sistema se funcionaliza con grupos amino, y se estudian los cambios en la adsorción para las especies de la ampicilina dependientes del pH del medio.

#### Resultados

Durante la adsorción, la molécula de ampicilina se aproxima en ambas superficies a través de sus átomos de nitrógeno y oxígeno, siendo más estable en la superficie  $\text{SiO}_2(001)$ . La estabilidad depende de los enlaces puente hidrógeno formados, y esto está de acuerdo con la densidad de silanoles de las superficies. La estabilidad de la ampicilina en  $\text{SiO}_2(111)$  se ve favorecida cuando la superficie se funcionaliza con los grupos amino, y se observa la mayor energía de adsorción en presencia de la especie desprotonada, a pH básico. Los cambios se atribuyen principalmente a la modificación de la distribución del HOMO-LUMO en comparación con la especie neutra, y en consecuencia, a las nuevas interacciones con la superficie funcionalizada que contribuyen con nuevos estados cerca del nivel de Fermi.

#### Conclusiones

La molécula de ampicilina es más estable en la superficie que posee mayor densidad de silanoles debido a la mayor cantidad de enlaces puente hidrógeno formados. La estabilidad mejora con la funcionalización, y es dependiente del pH (o de la especie predominante a cada pH).