



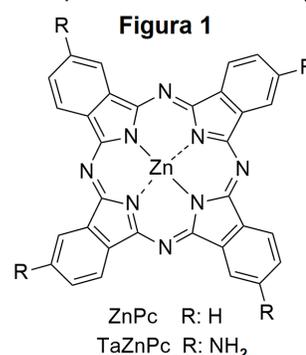
VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

Estudio teórico-experimental de ftalocianinas de zinc incorporadas en bicapas lipídicas

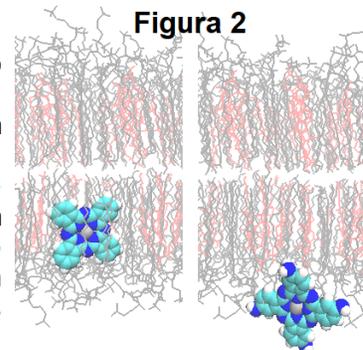
Gorod N S, Miretti M, Borioni, J L, Tempesti T C, Puiatti M, Baumgartner M T.

INFIQC-CONICET, Fac. de Cs. Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina
ngorod@unc.edu.ar

Las ftalocianinas (Pcs) son considerados excelentes fotosensibilizadores (FSs) para su utilización en terapia fotodinámica. La principal desventaja que poseen es su escasa solubilidad en medios acuosos, limitando su administración intravenosa. Para mejorar estos aspectos, se han desarrollado diferentes transportadores y sistemas de administración como liposomas, micelas y nanopartículas[1]. Los liposomas (LP) se emplean como medio efectivo de transporte de este tipo de moléculas en estudios experimentales y ensayos clínicos. Debido al carácter lipofílico, los FSs pueden quedar atrapados en las cadenas hidrofóbicas de la bicapa de fosfolípidos de los LP, disminuyendo la agregación y aumentando el efecto fototerapéutico[2]. En estudios anteriores, los LPs de dipalmitoilfosfatidilcolina (DPPC) demostraron ser buenos transportadores de Zn-ftalocianinas[3, 4]. Es por ello que se vehiculizaron dos Pcs, ZnPc y TaZnPc (Fig. 1) en LP de DPPC-colesterol. Los LP se sintetizaron por el método de inyección. Se evaluaron las propiedades fotofísicas, tanto absorción como fluorescencia, de las Pcs incorporadas en liposomas. Los espectros de absorción y de emisión no muestran diferencias en las longitudes de onda máxima respecto a las Pcs en solución de DMF.



Para poder entender en profundidad el mecanismo de interacción entre las distintas Pcs y la bicapa lipídica de los LPs (DPPC-colesterol), se han llevado a cabo estudios de dinámica molecular. A través de la metodología de dinámica libre se observa que ZnPC (Fig. 2, izquierda) se incorpora más rápidamente a la bicapa que TaZnPc (Fig. 2, derecha), quedando ZnPc retenida dentro de la misma, interaccionando favorablemente con las cadenas hidrocarbonadas. En el caso de TaZnPc, queda parcialmente insertada en la membrana interaccionando tanto con las cadenas hidrocarbonadas como con las cabezas polares de la bicapa. Además, se realizó un estudio teórico preliminar de interacción entre estas Pcs y un modelo de bicapa de DMPC, observándose incorporación y retención de ambos FSs en la región hidrofóbica de la bicapa a lo largo de toda la simulación. Si bien los ensayos experimentales demuestran que las Pcs poseen la capacidad de incorporarse e interaccionar con las cadenas lipídicas, las evaluaciones computacionales brindan detalle atómico de los mecanismos biofísicos involucrados.



[1] Miretti, M.; Prucca, C. G.; Tempesti, T. C.; Baumgartner, M. T. *Curr. Med. Chem.* **2021**, 28, 1-29.

[2] Sztandera, K. *et al. WIREs Nanomed. Nanobiotechnol.* **2020**, 12 (3), e1509.

[3] Soriano, J. *et al. Histochem. Cell Biol.* **2013**, 139 (1), 149-160.

[4] García, A. M.; Alarcon, E.; Munoz, M.; Scaiano, J. C.; Edwards, A. M.; Lissi, E. *Photochem. Photobiol. Sci.* **2011**, 10 (4), 507-514.