

Modulación de la reactividad en nanozimas de magnetita mediante funcionalización con alanina

Messias da Silva, Andresa¹; Grassano, Juan S.¹; Factorovich, Matias H.¹; da Silva, Claudia A.²; Nuñez, Nahuel²; Vásquez Mansilla, Marcelo²; Winkler, Elin²; Estrin, Dario A.¹; Ganduglia Pirovano, M. Veronica³; Sánchez, Veronica M.¹

¹ DQIAyQF-FCEyN-UBA, INQUIMAE-CONICET

² CAB-CNEA, INN-CONICET

³ ICP-CSIC

veronicasanchez210@gmail.com

Área temática: G. Aplicaciones de nanomateriales en ambiente, energía, agro, alimentos y catálisis

Las nanopartículas de magnetita (Fe_3O_4) constituyen un sistema paradigmático de nanozimas, siendo las primeras descritas con actividad intrínseca tipo peroxidasa y ampliamente empleadas en biomedicina [1]. En este contexto, la funcionalización superficial con moléculas orgánicas, como aminoácidos, no solo mejora la biocompatibilidad, sino que también puede modificar de manera significativa su reactividad catalítica. En particular, se ha reportado que la alanina (ALA) influye en la generación de especies reactivas de oxígeno durante la descomposición de H_2O_2 , aunque el origen microscópico de este efecto permanece poco claro [2].

En este trabajo combinamos experimentos y simulaciones para establecer una relación entre estructura superficial y función catalítica. Nanopartículas de Fe_3O_4 funcionalizadas con ALA fueron caracterizadas mediante espectroscopía infrarroja (IR) y resonancia paramagnética electrónica (EPR). Los resultados de EPR indican que la funcionalización no solo modifica la cantidad de especies reactivas generadas, sino también su evolución temporal, sugiriendo una modulación de la actividad catalítica.

Para racionalizar estos hallazgos, se llevaron a cabo simulaciones atomísticas orientadas a describir tanto la estructura como las características espectroscópicas del sistema. Mediante dinámica molecular clásica se determinó la estructura de solvatación de la ALA, utilizada como punto de partida para cálculos ab initio (DFT) del espectro IR. Asimismo, se analizaron configuraciones de adsorción mono- y bidentadas de ALA sobre la superficie reconstruida SCV(001) de Fe_3O_4 , en concordancia con estudios previos [3].

Los espectros IR calculados muestran que los perfiles vibracionales permiten discriminar entre modos de coordinación: en la adsorción monodentada, la intensidad del estiramiento simétrico del grupo COO- disminuye respecto al asimétrico, mientras que en la bidentada se observa el comportamiento opuesto. Experimentalmente, la presencia de una banda en torno a 1630 cm^{-1} se asocia con la adsorción monodentada, evidenciando este tipo de interacción en las nanopartículas funcionalizadas.

En conjunto, el análisis teórico-experimental proporciona una imagen consistente de la estructura superficial del sistema y muestra que la funcionalización con alanina modula la reactividad de la magnetita. Estos resultados abren nuevas vías para ajustar la actividad de nanozimas mediante el control químico de su interfaz orgánico-inorgánica.

REFERENCIAS

1. Gao, L. et al., Nat. Nanotechnol. 2 (2007) 577–583
2. K. Fan et al Chem. Commun., 53 (2017) 424-427
3. C. Daldossi et al J. Chem. Phys. 162 (2025) 144705