

## Modificación superficial de ZnO NPs con aminoácidos: efecto sobre la estabilidad y reactividad

González, Willian<sup>1</sup>; Medina, Analía V.<sup>2,3</sup>; Ledesma, Ana E.<sup>2,4</sup>; Pérez, Hugo A.<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias Exactas y Tecnologías-Universidad Nacional de Santiago del Estero. Santiago del Estero. Argentina

<sup>2</sup> Departamento Académico de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnologías-Universidad Nacional de Santiago del Estero. Santiago del Estero. Argentina

<sup>3</sup> Instituto de Ciencias Químicas, Facultad de Agronomía y Agroindustrias-Universidad Nacional de Santiago del Estero. Santiago del Estero. Argentina

<sup>4</sup> Centro de Investigación en Biofísica Aplicada y Alimentos (CIBAAL-UNSE-CONICET). Santiago del Estero. Argentina

hugo19perez@gmail.com

Área temática: C. Propiedades de nanomateriales

La nanotecnología constituye un campo emergente con aplicaciones en medicina, medio ambiente y electrónica. En este contexto, las nanopartículas de óxido de zinc (ZnO-NPs) han despertado gran interés debido a sus propiedades fisicoquímicas y su potencial en el reconocimiento de biomoléculas. Aunque se ha demostrado que las ZnO-NPs pueden interactuar con aminoácidos modificando sus propiedades fisicoquímicas y biológicas, existe aún un conocimiento limitado sobre el efecto diferencial de aminoácidos específicos en la modulación de su actividad antirradicalaria. En particular, los estudios comparativos que vinculen la naturaleza de los grupos funcionales con la respuesta antioxidante siguen siendo escasos. En este contexto, el presente trabajo aborda de manera integral la interacción de ZnO-NPs con aminoácidos aromáticos triptófano (Trp), tirosina (Tyr) e histidina (His), con el objetivo de correlacionar la funcionalización superficial con los cambios en su bioactividad, aportando criterios para el diseño de nanomateriales con aplicaciones biomédicas.

La caracterización mediante espectroscopía UV-Visible y fluorescencia evidenció cambios en las señales espectrales asociados a la interacción ZnO–aminoácidos. La disminución en la intensidad de fluorescencia permitió determinar constantes de Stern–Volmer cercanas a  $2000 \text{ M}^{-1}$  para Trp y Tyr y superiores para His ( $\approx 4700 \text{ M}^{-1}$ ) a  $25^\circ\text{C}$ . Asimismo, se observó un aumento del tamaño hidrodinámico y una disminución del potencial zeta, lo que sugiere una mayor estabilidad coloidal tras la adsorción.

Los cálculos teóricos (DFT/B3LYP/Lanl2DZ) indicaron la formación de complejos ZnO–aminoácidos, principalmente estabilizados mediante enlaces de hidrógeno. Finalmente, la capacidad antirradicalaria, determinada mediante los ensayos DPPH<sup>•</sup> y ABTS<sup>•+</sup>, mostró un incremento significativo tras la funcionalización de las ZnO-NPs con aminoácidos. El efecto fue más notable en el sistema con tirosina, en tanto que triptófano e histidina presentaron mejoras similares entre sí, aunque de menor magnitud, lo que sugiere una contribución diferencial de los grupos funcionales en los mecanismos de neutralización de radicales.

En conjunto, los resultados confirman que la funcionalización con aminoácidos mejora las propiedades de las ZnO-NPs, posicionándolas como nanomateriales prometedores para aplicaciones en diagnóstico y terapias asociadas a enfermedades complejas.