

Develando la interacción de moléculas confinadas en nanosistemas híbridos inteligentes

Bonafé Allende, Juan Cruz; Cabrera Molina, María de Los Ángeles; Gonzalez Solveyra, Estefanía; Soler Illia, Galo J.A.A.; Contreras, Cintia Belen

Instituto de Nanosistemas EByN-UNSAM, San Martín, Argentina

jcbonafeallende@unsam.edu.ar

Área temática: C. Propiedades de nanomateriales

La investigación en nanomateriales ha evolucionado desde el estudio de compuestos individuales hacia el diseño de nanosistemas integrados, cuyas propiedades emergen de la jerarquización espacial de nanobloques a escala molecular, mesoscópica y micrométrica. El desafío actual consiste en dominar dicha organización, especialmente en nanosistemas responsivos a estímulos externos que experimenten transiciones físicas o químicas abruptas en respuesta a su microentorno.¹ En particular, las nanoesferas de oro pueden recubrirse con una coraza de sílice (SiO_2) que, a su vez, permite la funcionalización con polímeros responsivos, dando lugar a nanosistemas híbridos inteligentes (NHI) prometedores como vehículos de compuestos útiles para diagnóstico y terapia.² No obstante, para optimizar el transporte y la liberación de estos compuestos, se requiere una mayor comprensión de los procesos de adsorción-desorción y de la nanofluídica en espacios confinados.

En este trabajo, se diseñaron NHI con corazas de SiO_2 mesoporosa o densa, recubiertas con copolímeros en forma de cepillos formados por poli(NIPAM-co-ácido acrílico) capaces de responder a cambios de pH y temperatura. Estos NHI se cargaron con un fármaco modelo fluorescente (doxorubicina, Dox) capaz de establecer interacciones electrostáticas. Los resultados iniciales mostraron diferencias en la eficiencia de carga entre los distintos sistemas, indicando una dependencia con la mesoestructura de la coraza. A continuación, se propuso estudiar el comportamiento de este fármaco confinado en nanoporos, relacionando sus interacciones con el NHI y la viscosidad del microentorno mediante espectrofluorimetría. Para ello, se utilizó la ecuación de Stokes-Einstein-Debye, que relaciona la viscosidad con el tiempo de correlación rotacional medido a través de la anisotropía de fluorescencia.

Asimismo, se planteó estudiar los tiempos de vida y la anisotropía de fluorescencia de Dox en solución y confinada en los NHI a 25 °C y pH 7,4, con el fin de comprender las interacciones material-fármaco que explicarían las eficiencias de carga obtenidas y su posterior liberación. Adicionalmente, se empleó la herramienta de modelado computacional MOLT para analizar la distribución molecular de las especies del sistema, gobernada por las interacciones dominantes en estas condiciones.³

Este enfoque nanoreológico permitirá explicar las diferencias en la carga y liberación de Dox, vinculando las propiedades moleculares con el desempeño del NHI

REFERENCIAS

¹ Guan, G., *et al. Advanced Functional Materials*, 30(2) (2020) 1903439

² Améndola, I. F., *et al. European Polymer Journal* 204 (2024) 112717

³ Nap, R. J., *et al. Biomaterials science* 6(5) (2018) 1048-1058