

Nanotecnología Farmacéutica: est comput de transportadores de drogas

INTRODUCCIÓN

El fluoruracilo (5-FU) es un antineoplásico que pertenece a los antimetabolitos. Difiere del uracilo en un átomo de flúor añadido en la posición 5. Se utiliza para el tratamiento de tumores sólidos (mama, colorectales, etc). El uso puede producir recuento bajo de células sanguíneas, vómitos, diarrea, etc.

OBJETIVOS

Contribuir a la mejora de la administración del 5-FU dirigiendo el fármaco sobre una matriz porosa de sílica, la β -Cristobalita (111) hidroxilada, a fin de evitar sus efectos adversos indeseables. Se estudian y se analizan las propiedades de adsorción sobre la matriz mediante métodos computacionales.

METODOLOGÍA

Los cálculos presentados en este trabajo fueron realizados utilizando la Teoría del Funcional de Densidad (DFT) a través de VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) y aplicando la corrección de Grimme's D-2.

Dr. Andrés C. D. Díaz Compañy

Farmacéutico, Universidad Nacional del Sur
Universidad Nacional del Sur
Dra. Sandra Isabel Simonetti
Física, Matemática, Química y Astronomía
andresdc5@hotmail.com

RESULTADOS

-Density functional theory based-study of 5-fluorouracil adsorption on β -cristobalite (1 1 1) hydroxylated surface: The importance of H-bonding interactions
Applied Surface Science 359 (2015) 474-479.

CONCLUSIONES

La matriz de la superficie hidroxilada se presenta como potencial candidato para la entrega controlada del fármaco 5-FU, los enlaces puente hidrógeno que se producen entre la matriz y el fármaco estabilizan y favorecen el anclaje del 5-FU en la matriz.

