



## ESTUDIOS TEÓRICO-COMPUTACIONALES SOBRE LAS INTERACCIONES ENTRE MOLÉCULAS ANTIOXIDANTES Y GRAFENO Y SUS NUEVOS DERIVADOS

Brenda Manzanilla, Juvencio Robles

Departamento de Farmacia, DCNE, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato.

Noria Alta S/N, CP 36050. Guanajuato, Gto, México.

### Resumen

Los antioxidantes o antirradicales son moléculas capaces de retardar o inhibir el daño celular causado por el estrés oxidativo, provocado por los radicales libres que se presentan de manera natural en el organismo.<sup>1,2</sup> Pero, debido a factores como malos hábitos y contaminación ambiental, los radicales libres son producidos en altas cantidades ocasionando dicho estrés oxidativo.<sup>3</sup> En la biomedicina se han empleado nanopartículas y otros dispositivos nanoestructurados que permiten disminuir la dosis de ciertos fármacos permitiendo que éstos sean transportados y se localicen eficientemente en el sitio de acción.

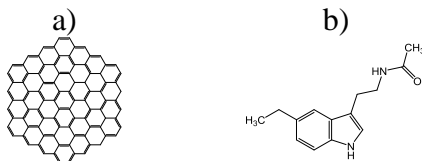


Figura 1.

Considerando lo anterior, en este trabajo se propone el estudio del grafeno (G), (Fig. 1a) y algunos derivados para que funcionen como transportadores y liberadores de moléculas antirradicales, lo que permitirá dirigirlas hacia células que sufran estrés oxidativo, frenar tal proceso y evitar la aparición de diversas enfermedades. Este estudio se ha llevado cabo mediante los métodos de la Química

Teórica y Computacional al nivel del estado del arte de la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT).

Como resultados, se ha analizado la reactividad del grafeno y los derivados (grafano, fluorografeno, óxido de grafeno, grafeno dopado, grafino y grafidiino) empleando los descriptores de la DFT conceptual. A su vez, se ha estudiado algunos antirradicales como la melatonina (Fig. 1b) y sus metabolitos activos, vitaminas y compuestos de productos naturales. De éstos últimos, se han evaluado posibles mecanismos de acción que pueden presentarse dentro de la célula estresada. Se han determinado los sitios de interacción con moléculas nucleofílicas o electrofílicas lo que permite identificar su interacción con G y, verificar que las capacidades antirradicales sean potenciadas y puedan llegar al sitio de acción eficientemente.

### Referencias

1. M. Pisoschi and A. Pop, *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2015, 97, 55-74.
2. H. Sies, C. Berndt and D. P. Jones, *Annual Review of Biochemistry*, 2017, 86, 715-748.
3. S. B. Nimse and D. Pal, *RSC Advances*, 2015, 5, 27986-28006.