



Nanocápsulas de Carbono para Dirigir Medicamentos (Yoduro de Potasio) a Zonas Específicas del Cuerpo

M. en C. Alejandro Valderrama Zaldivar¹, Dr. José Guzmán Mendoza¹ y Dr. Luis Fernando Magaña Solís²

¹Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del Instituto Politécnico Nacional, Legaria 694. Colonia Irrigación, 11500 México D. F.

²Departamento de Estado Sólido, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Avenida Insurgentes 3000, Coyoacán, 04510. Apartado Postal 20-364. Ciudad de México.

Resumen

En este proyecto se aplicará la Teoría de la Funcional de Densidad electrónica (DFT) para la simulación, cálculo y determinación, mediante dinámicas moleculares (MD) realizadas con supercómputo, de moléculas que puedan ser incrustadas en la superficie de una nanocápsula de carbono, con contenido radioactivo de yoduro de potasio (KI) que tengan afinidad con tejidos humanos específicos, en particular con las células neoplásicas, a los cuales se les pueda dar tratamiento contra el cáncer logrando la medicación localizada en la escala celular.

Introducción

El cáncer, como se sabe, es una de las enfermedades más terribles que enfrenta la humanidad, sus causas son tan variadas como amplio el espectro de personas que pueden desarrollar esta enfermedad. En la actualidad existen muchos métodos para tratar esta enfermedad en sus diferentes manifestaciones en el interior del cuerpo humano. Sin embargo, debido a que en los diversos tejidos celulares, se presenta el cáncer con la alteración de sólo algunos grupos celulares resulta muy difícil combatir las neoplasias debido a que las células enfermas se encuentran en contacto con células sanas. El lograr que un medicamento o terapia de radiación discrimine entre las células enfermas y las células sanas es el reto por resolver hoy en día.

Debido al carácter celular de esta enfermedad, se hace necesario el poder medicar los tejidos enfermos en esa escala, a nivel celular y de manera localizada. Por ese motivo resulta conveniente el uso de las nanotecnologías para abordar el problema médico. La caracterización de los medicamentos usados en la actualidad a nivel nanoscópico o molecular puede permitir el que se puedan integrar como nuevos vehículos para el suministro intravenoso de manera tal que se logre la medicación localizada. Hoy en día, ya se nano encapsulan medicamentos para suministro intravenoso pero aun no se les puede dirigir correctamente y con la precisión necesaria para que se apliquen de manera específica y localizada en el interior del cuerpo.

Procedimiento de Investigación

Es necesario investigar la posibilidad de usar diferentes átomos (puntos cuánticos) y moléculas, y en particular aquellas con gran afinidad por la glucosa, como reconocedores moleculares incrustados en las nanocápsulas. Para ello, proponemos abordar el problema del reconocimiento de tejidos neoplásicos usando simulaciones

computacionales para aplicar la Teoría de la Funcional de Densidad en el cálculo de las interacciones entre las nanocápsulas de carbono, con contenido de yoduro de potasio, y algunas moléculas que puedan ser utilizadas como reconocedores moleculares específicos.

Resultados

La determinación de algunas moléculas que al incrustarse en la superficie de las nanocápsulas de carbono puedan ser utilizadas como reconocedores de células neoplásicas para llevar a cabo una medicación localizada a nivel celular es el principal resultado que se espera de esta investigación. Las simulaciones y dinámicas moleculares realizadas con el poder del supercómputo en paralelo, pueden permitir, mediante la aplicación de la química cuántica molecular y el uso de la Teoría de Funcional de Densidad, el estudio, análisis y caracterización de los sistemas moleculares, permitiendo la exploración de la interacción molecular mediante la aplicación de nuevas metodologías y con menores costos que el trabajo de laboratorio experimental.

Agradecimientos

Agradecemos a la SIP del IPN, por el apoyo a través del proyecto 20100557 al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (Conacyt), al Instituto de Física (IFUNAM) y a la Dirección de Servicios de Cómputo Académico (DGSCA-UNAM) por su apoyo para la próxima realización de esta investigación.

Referencias

- [1] NATURE MATERIALS, Volume: 9, Pages: 485–490 Year published: (2010) DOI: doi:10.1038/nmat2766 Received 02 October 2009 Accepted 08 April 2010 Published online 16 May 2010.
- [2] Kostas Kostarelos THE LONG AND SHORT OF CARBON NANOTUBE TOXICITY. *Nature Biotechnology* **26**, 774 - 776 (2008) doi:10.1038/nbt0708-774.
- [3] Patrick Quillin. "EL CANCER SE ALIMENTA DE AZUCAR". "VENCER EL CÁNCER MEDIANTE LA NUTRICIÓN". Centro de Tratamiento del Cáncer en América, Tulsa, Okla. Nutrition Times Press, 1998.
- [4] Dominik Marx and Jurg Hutter. AB INITIO MOLECULAR DYNAMICS: THEORY AND IMPLEMENTATION. John von Neumann Institute for Computing, NIC Series, Vol. 3, ISBN 3-00-005834-6, pp. 329-477. Zurich (2000).
- [5] Paolo Giannozzi. NOTES ON PSEUDOPOTENTIAL GENERATION. Scuola Normale Superiore di Pisa. (2007).
- [6] Alejandro Valderrama. INTERACCIÓN DE COBRE, FÓSFORO Y OZONO CON LA SECCIÓN DE FULLERENO C₆₀₋₂₀ EN UN SUSTRATO DE SILICIO. Tesis de Maestría en Ciencias (Física), IFUNAM, 2009.