



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UNA MACROMOLÉCULA DERIVADA DE DPP Y TRIFENILAMINO PARA SU POTENCIAL APLICACIÓN EN TERAPIA FOTODINÁMICA

Vanesa Escalona¹, Rosa Angeles vázquez García¹, María Aurora Veloz Rodríguez¹, Itzia Irene Padilla Martínez² y Oscar Javier Hernández Ortiz²

1 Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 2 Instituto Politécnico Nacional- UPIBI. es334895@uaeh.edu.mx

En los años se han desarrollado materiales basados en moléculas orgánicas con sistema π -conjugado para una gran gama de aplicaciones, principalmente para optoelectrónica. Sin embargo, sus propiedades intrínsecas las han hecho atractivas para aplicaciones biomédicas, tal como su empleo como materiales fotosensibilizadores en terapia fotodinámica. La cual consiste en irradiar al material fotosensibilizador que a su vez promueve la generación de especies reactivas de oxígeno en el interior de las células cancerosas, lo cual induce a la apoptosis celular. Se presenta el estudio de una macromolécula derivada de DPP y trifetilamino, (DPP-BisTPA) por química computacional, su síntesis por arilación directa, caracterización óptica (UV-Vis y de fluorescencia) y electroquímica (voltamperometría cíclica), así como su evaluación como generador de especies reactivas de oxígeno de manera indirecta, mediante la degradación de ácido úrico. Los resultados obtenidos por DFT mediante B3LYP/6-31G (d, p) y TD-DFT mediante CAM-B3LYP/6-31G (d, p) develan valores de niveles de energía del primer estado excitado singlete y triplete que indican un posible cruce intersistema y la posible generación de especies reactivas de oxígeno por un mecanismo de tipo I. El compuesto presenta una región de absorción dentro de la ventana fototerapéutica. El bandgap electroquímico es de 1.64 eV que sugiere un comportamiento como semiconductor. DPP-BisTPA, exhibió generación de especies reactivas de oxígeno al ser reprecipitado como nanopartículas al ser irradiado con una lámpara de fototerapia. Con base a los resultados obtenidos, DPP-BisTPA es una macromolécula con absorción dentro de la ventana fototerapéutica, que aprovecha dicha absorción y exhibe generación de especies reactivas de oxígeno, por lo cual es un material prometedor para evaluarse como fotosensibilizador para terapia fotodinámica.