



## ESTUDIO TEÓRICO DE LA MICROSOLVATACIÓN DEL CIS-DIAMINODICLOROPLATINO (II)

Estefanía Ravell<sup>1</sup>, Alba Vargas-Caamal<sup>1</sup>, Filiberto Ortiz-Chi<sup>2</sup>, José Luis Cabellos<sup>1</sup>, Gabriel Merino<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación y de Estudios Avanzados Unidad Mérida, Depto. Física Aplicada, Km 6 Antigua carretera a Progreso, Cordemex 97310 Mérida, Yucatán, México

<sup>2</sup>Cátedra CONACYT, División Académica de ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, C.P. 86690, Cunduacán, Tabasco; México.  
email:estef\_89@outlook.com

El *cis*-diaminodicloroplatino (II) es un medicamento muy utilizado en el tratamiento de varios tipos de cáncer. Al comienzo del siglo XXI se empezó a investigar su mecanismo de acción en el interior de células cancerígenas.<sup>1</sup> La actividad biológica del medicamento dentro del citoplasma depende del desplazamiento de los átomos de Cl en el compuesto de Pt por moléculas de agua de una manera escalonada formando un complejo monohidratado y después un dihidratado. Dicho complejo reacciona con el ADN de la célula cancerígena ocasionando su apoptosis. Sin embargo, a nivel molecular se tiene la interrogante de cómo se lleva a cabo el mecanismo de sustitución y qué tipo de interacciones existen entre las moléculas de agua y el medicamento para desplazar a los átomos de cloro. El objetivo de este estudio es localizar el mínimo global y estudiar las interacciones en los cúmulos formados por el *cis*-diaminodicloroplatino(II) y moléculas de agua (1 hasta 5), empleando la teoría del funcional de la densidad (PBE0/def2-TZVP) tal y como está implementada en *Bilatu*.

[1]Andersson, A.; Hedenmalm, H.; Elfsson, B. and Ehrsson, H. Determination of the acid dissociation constant for *cis*-diammineaquachloroplatinum (II) ion. A hydrolysis product of cisplatin. *J. Pharm.sci.* **1994**, 83(6), 859-862.

[2]Robertazzi, A. and Platts, J. A. Hydrogen bonding, solvation, and hydrolysis of cisplatin: a theoretical study. *J. Comput. Chem.* **2004**, 25(8), 1060-1067.