



## Análisis y propuesta teórica de porfirinas tipo A<sub>3</sub>B para ser utilizadas como fotosensibilizadores en la terapia fotodinámica

Nestor Daniel Ramos Camacho<sup>1,2</sup>, Francisco J. Meléndez<sup>1</sup>, Norma A. Caballero<sup>1</sup>,  
Ma. L. Roxana Licona I.<sup>2</sup> Ramsés Elías Ramírez Gutiérrez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>LabQT, C. I. FCQ-BUAP. Dpto. de Físicoquímica. Puebla, Pue. 72570, México.

<sup>2</sup>Departamento de Fisicomatemáticas, FCQ-BUAP Puebla, Pue. México.

[ramos.camacho.nestor@gmail.com](mailto:ramos.camacho.nestor@gmail.com)

En la actualidad existen tratamientos para controlar y erradicar el cáncer, una alternativa emergente es la terapia fotodinámica (PDT, por sus siglas en inglés: *Photodynamic Therapy*), ésta consiste en la administración de un fármaco o fotosensibilizador seguido por la irradiación de ondas del espectro visible para matar células cancerígenas. Los fotosensibilizadores de segunda generación son capaces de tratar tumores más profundos bajo la piel, tiene mayor selectividad hacia células cancerígenas y una acumulación más rápida hacia éstas células. Las porfirinas son fotosensibilizadores de uso más común en la PDT por su eficiencia en la generación de especies reactivas de oxígeno.

Utilizando la química computacional se optimizaron las geometrías de tres moléculas de porfirina (TPP, NS4E y NS6E) [1], posteriormente se determinaron sus espectros IR, RMN y Uv-Vis. Los métodos y conjuntos de base empleados para obtener las optimizaciones de las geometrías moleculares y los espectros fueron los siguientes: RHF/6-31+G\*\*, B3LYP/6-31+G\*\*, B3LYP/6-311+G (2d, 2p) y MP2/6-31+G\*\*. Todos los cálculos se llevaron a cabo con el programa Gaussian 09[2] y se visualizaron en GaussView05. Los resultados obtenidos se compararon con los experimentales para obtener un porcentaje de similitud confiable. Con dichos resultados se proponen dos nuevas porfirinas con sustituyentes de vanadio [3], esto debido a la atracción de este elemento hacia las células cancerígenas. Dichas moléculas fueron estudiadas para determinar su eficiencia como fotosensibilizadores en el tratamiento de cáncer.

### Referencias:

- [1] Loredo, C. E. Síntesis de nuevas porfirinas A<sub>3</sub>B con *p*-clorofenilo como uno de los sustituyentes *meso* y determinación de su potencial; Actividad fotosensibilizadora *in vitro*. Tesis de Maestría. Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, 2011.
- [2] *Gaussian 09*, version 2009 E.01, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B. et al Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
- [3] Novotny, L.; Kombian, S. B. Vanadium: Possible use in cancer chemoprevention and therapy. *J. of Can. Res. Upd.* 2014.