



## EFFECTO DE LA DESACETILACIÓN DEL QUITOSANO

María De Lourdes Lozano<sup>1</sup>, Javier Hernández<sup>1</sup>, Inocencio Higuera<sup>2</sup>, Roberto López-Rendón<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Unidad de Servicios de Apoyo en Resolución Analítica, Universidad Veracruzana, Av. Dr. Luis Castelazo Ayala S/N, Col. Industrial Ánimas, CP 91190, Xalapa, Ver, México

<sup>2</sup>Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado de Jalisco, Av. Normalistas 800, Col. Colinas de la Normal, CP 44270, Jalisco, Gdl, México

<sup>3</sup>Laboratorio de Bioingeniería Molecular a Multiescala, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de México, Av. Instituto Literario 100, 50000, Toluca, México

e-mail: lourdes\_lozanocoav@yahoo.com.mx

El quitosano se ha empleado como materia prima en la elaboración de nanopartículas para el transporte de moléculas orgánicas con actividad anticancerígena. En este trabajo se presenta un estudio de las interacciones moleculares del quitosano con diferentes grados de desacetilación (60%, 70%, 80% y 90%) usando métodos de simulación de dinámica molecular. Las interacciones moleculares fueron evaluadas mediante tres campos de fuerza: OPLS, CHARMM y SWISSPARAM. Se discuten las ventajas y desventajas entre estos campos de fuerza en la predicción en la formación de puentes de hidrógeno entre OH3 ---O5 [1,2], que son responsables de la flexibilidad y rigidez de la cadena polimérica del quitosano. Adicionalmente, se presenta un análisis sobre la elección de estos campos de fuerza para estudiar las interacciones entre quitosano y capsaicina, esta última responsable de la sensación de ardor de chile y a la cual se le atribuye actividad anticancerígena.

### Referencias:

1. Franca, E.; Freitas, L.; Lins, R. Chitosan Molecular Structure as a Function of N-Acetylation. *Biopolymers* 2011, 95(7), 448-460.
2. Cui, J.; Yu, Z.; Lau, D. Effect of Acetyl Group on Mechanical Properties of Chitin/Chitosan Nanocrystal: A Molecular Dynamics Study. *Int. J. Mol. Sci.* 2016, 17, 61.