

# Studio di Dinamica Molecolare dell'Adsorbimento di Ciprofloxacina su Nano-Tubi di Carboni

Daniele Veclani, Andrea Melchior, Marilena Tolazzi

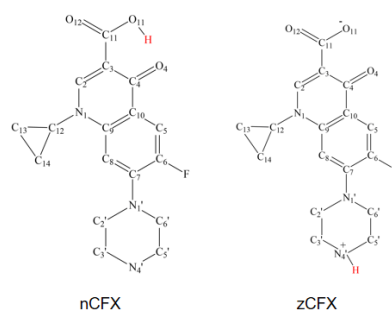
Dipartimento Politecnico di Ingegneria e Architettura, Laboratori di Scienze e Tecnologie Chimiche, Università di Udine, Via del Cottonificio 108, 33100 Udine, Italy

[veclani.daniele@spes.uniud.it](mailto:veclani.daniele@spes.uniud.it)

**Keywords:** Fluorochinoli, Ciprofloxacina, Nano-tubi di Carbonio, Dinamica Molecolare,

## Introduzione

I Fluorochinoli sono una classe di antibiotici sintetici, utilizzati nel trattamento di malattie infettive sia negli esseri umani che negli animali. Negli ultimi anni l'uso irrazionale di tali antibiotici ha portato all'inquinamento delle acque, del suolo e del cibo, provocando, inoltre, un incremento del fenomeno di farmaco-resistenza verso questa classe di antibiotici [1]. Diventa quindi estremamente importante studiare le proprietà di tali composti, sia per la rimozione di tali specie dall'ambiente, sia per l'incremento delle proprietà farmacologiche. In questo lavoro è stato scelto come modello rappresentativo la ciprofloxacina (CFX, Schema 1), il fluorochinolone più prescritto al mondo, dov'è stato studiato l'adsorbimento su nano-tubi di carboni (CNT).



**Schema 1.** Forma neutra e zwitterionica della ciprofloxacina.

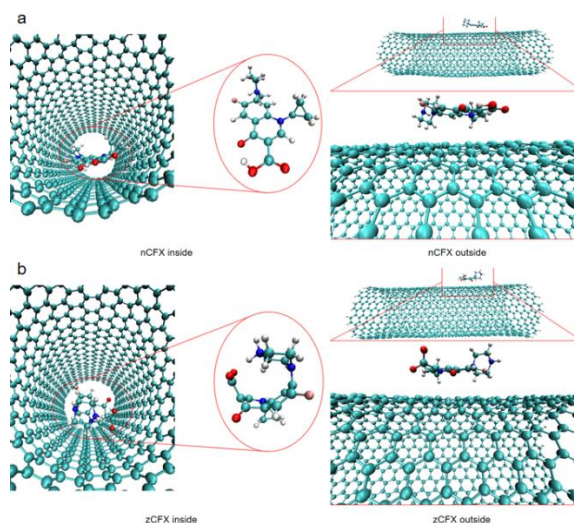
I CNT vengono applicati come sistemi adsorbenti per la rimozione di inquinanti ambientali a causa della loro elevata capacità di adsorbimento e della buona capacità di rigenerazione [2]. Sperimentalmente il meccanismo di adsorbimento proposto consta in due fasi: una veloce saturazione della superficie esterna del CNT seguita da una fase più lenta dove la specie diffonde all'interno della struttura porosa [3]. Lo scopo del lavoro è quello di valutare l'adsorbimento di CFX, nella forma neutra (nCFX) e zwitterionica (zCFX), sulla superficie esterna del CNT e di studiarne la diffusione all'interno di esso. Si sono scelte queste due forme perché sperimentalmente è stato dimostrato che in acqua a pH 7 si ha la formazione di tali specie [4].

## Materiali e metodi

E' stato costruito un CNT (14,14) armchair (diametro circa 2 nm) è di lunghezza di 6 nm con idrogeni terminali, le cariche, sia dei carboni che degli idrogeni, sono state poste a 0. L' adsorbimento di zCFX e nCFX su CNT è stato condotto attraverso simulazioni di dinamica molecolare utilizzando il pacchetto Gromacs 5.0.4, usando come force field il GROMOS. Inizialmente sono state condotte simulazioni in vuoto per valutare l'energia di interazione ( $E_{int}$ ) tra il CFX e il CNT. Successivamente sarà calcolata l'energia di legame ( $\Delta G_{bind}$ ) attraverso la tecnica di umbrella sampling [5] studiando, in acqua, l'avvicinamento di zCFX e di nCFX alla superficie esterna del CNT e l'incapsulamento all'interno di esso.

## Risultati e discussione

Lo studio è iniziato andando a valutare il tipo di interazione che si genera tra nCFX e zCFX e CNT nel vuoto sia all'interno che all'esterno di quest'ultimo. In Figura 1 vengono riportate strutture di nCFX e di zCFX all'interno e all'esterno del CNT.



**Figura 1.** strutture di nCFX e di zCFX all'interno e all'esterno del CNT di un singolo snapshot.

L'energia di interazione ( $E_{int} = E_{CNT+CFX} - (E_{CNT} + E_{CFX})$  dove  $E_{CNT+CFX}$  è l'energia potenziale del complesso CFX e CNT,  $E_{CNT}$  è l'energia potenziale solo del CNT nella configurazione che ha nel complesso,  $E_{CFX}$  è l'energia potenziale solo del CFX nella configurazione che ha nel complesso) viene riportata in Tabella 1

**Tabella 1.** Energie di interazione tra CNT e nCFX e zCFX

	$E_{int}$ kcal mol <sup>-1</sup>
nCFX inside	-33.6
nCFX outside	-24.8
zCFX inside	-30.8
zCFX outside	-24.9

Possiamo osservare che sia per nCFX che per zCFX sia ha una  $E_{int}$  più negativa quando si trovano all'interno del CNT rispetto a quando si trovano sulla superficie esterna. E sembra che la forma neutra abbia una energia di interazione leggermente maggiore (circa 3 kcal mol<sup>-1</sup>) rispetto la forma zwitterionica. Possiamo quindi concludere che nel vuoto il CFX è più stabilizzato quando si trova all'interno del CNT. Il lavoro proseguirà andando a calcolare  $\Delta G_{bind}$  attraverso la tecnica di umbrella sampling.

## Bibliografia

- [1] A. Rusu, C. Hancu, V. Uivarosi, *Environ. Chem. Lett.* 13, 21–36, (2015)
- [2] J. Yu, X. Zhao, L. Yu F. Jiao J. Jiang X. Chen, *J Radioanal Nucl Chem*, 299, 1155–116, (2014)
- [3] M. C. Ncibi, M. Sillanpää, *J. Hazard. Mater.*, 298, 102–110, (2015)
- [4] A. Rusu, G. Toth, L. Szocs, J. Kokosi, M. Kraszni, A. Gyeresi, B. Noszal, *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 66, 50–57, (2012)
- [5] G. M. Torrie, J. P. Valleau, *J. Comput. Phys.*, 23, 187-199, (1977)