



## ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN Y LIBERACIÓN DE IBUPROFENO EN MOFs BIO-COMPATIBLES MEDIANTE SIMULACIONES DE GCMC

M.C. Bernini<sup>(1)</sup>\*, D. Fairén-Jimenez<sup>(2,3)</sup>, M. Pasinetti<sup>(1)</sup>, A. Ramirez-Pastor<sup>(1)</sup>,  
R.Q. Snurr<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> Grupo de Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA. <sup>(2)</sup> Department of Chemical and Biological Engineering, Northwestern University, Evanston, Illinois, United States. <sup>(3)</sup> Department of Chemical Engineering and Biotechnology, University of Cambridge, United Kingdom.

\*[mcbernin@unsl.edu.ar](mailto:mcbernin@unsl.edu.ar)

### RESUMEN

Los MOFs (Metal Organic Frameworks) son compuestos cristalinos cuyas redes orgánico-inorgánicas están constituidas por clusters metálicos de distinta dimensionalidad, los cuales se autoensamblan covalentemente con ligandos orgánicos multifuncionales, generando redes poliméricas periódicas con cavidades o canales. Una de las aplicaciones más reciente de los MOFs es su uso como soportes en liberación controlada de fármacos.<sup>[1]</sup> Las simulaciones de GCMC han sido muy útiles para comprender el proceso de adsorción de gases livianos y líquidos en materiales porosos, permitiendo predecir y explicar resultados experimentales de una manera precisa y realista.<sup>[2]</sup> En este contexto, se han utilizado por primera vez simulaciones de GCMC para estudiar la adsorción de moléculas de un fármaco modelo (ibuprofeno) en MOFs bio-compatibles. Primeramente, los resultados fueron validados con datos experimentales disponibles para la adsorción y liberación del fármaco en MIL-53(Fe), MIL-100(Fe) y MIL-101(Cr).<sup>[1]</sup> Se analizó la máxima capacidad de adsorción de cada MOF; la forma de las isotermas de adsorción simuladas; la localización de las moléculas del fármaco en las estructuras porosas utilizando funciones de distribución radial (RDF) y snapshots, y la dependencia del calor isostérico de adsorción ( $Q_{st}$ ) con la carga de ibuprofeno en estos MOFs. Luego, se amplió el estudio a tres MOFs bio-compatibles basados en metales no tóxicos (MOF-74 (Mg)), ligandos de carbohidratos (CD-MOF-1) y con volumen de poro en el rango de mesoporos (BioMOF-100).

**Palabras clave:** MOFs, GCMC, Ibuprofeno, Adsorción.

### Referencias

- [1] Horcajada, P.; Gref, R.; Baati, T.; Phoebe, T.; Allan, K.; Maurin, G.; Couvreur, P.; Ferey, G.; Morris, R.E.; Serre, C. *Metal-Organic Frameworks in Biomedicine*, Chem. Rev. 2012, 112, 1232–1268.
- [2] Düren, T.; Bae, Y. S.; Snurr, R. Q. *Using molecular simulation to characterise metal-organic frameworks for adsorption applications* Chem. Soc. Rev. 2009, 38, 1237.