

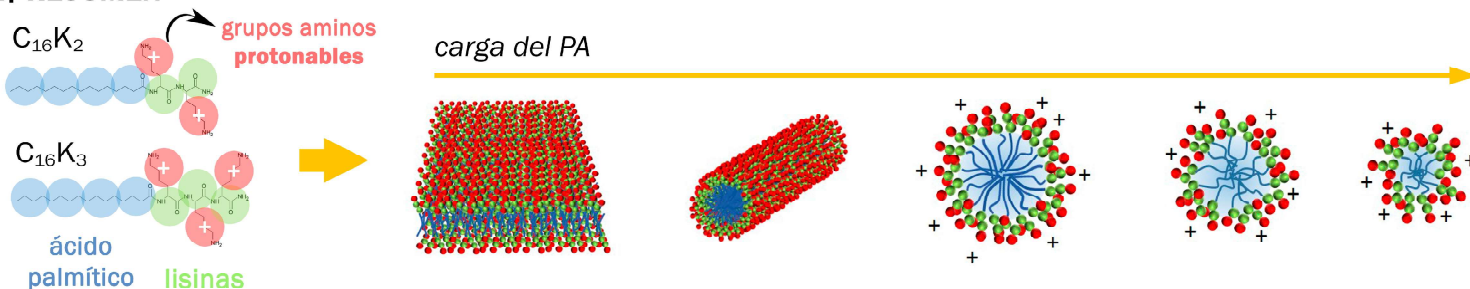
Gervasio Zaldivar¹, Sridhar Vemulapalli², Venkatareddy Udumula², Martín Conda Sheridan² y Mario Tagliacruzchi¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física - Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires

² Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía - CONICET/Universidad de Buenos Aires

² Department of Pharmaceutical Science, College of Pharmacy, University of Nebraska Medical Center - Omaha, Nebraska, EEUU

1| RESUMEN



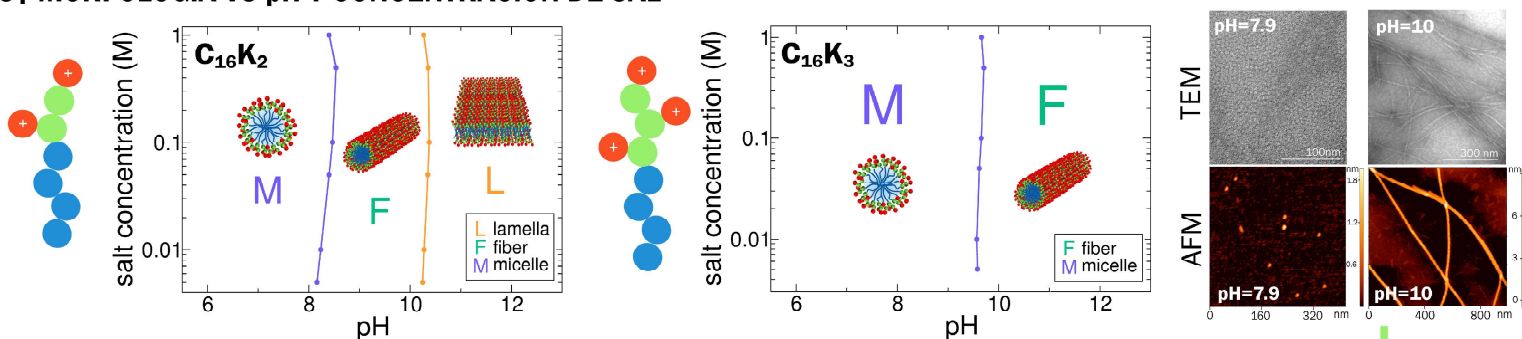
2| TEORÍA MOLECULAR^{1,2}

$$\beta F = \sum_{i=\text{sol}, C, H^+, OH^-, Na^+, Cl^-} \int dr G(r) \rho_i(r) [\ln(\rho_i(r) v_{sol}) - 1] + \int \rho_c(r) \sum_{\alpha} P(\alpha, r) \ln[P(\alpha, r)] G(r) dr + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \iint dr dr' G(r) G(r') \langle n_i(r) \rangle \langle n_j(r') \rangle \beta \epsilon_{ij} g_{ij}(r, r')$$

$$+ \beta \int \left[\langle \rho_{\alpha}(r) \rangle \psi(r) - \frac{\epsilon(r)}{2} [\nabla \cdot \psi(r)]^2 \right] G(r) dr + \sum_{i=\text{type of titratable segment}} \int dr G(r) \langle n_i(r) \rangle [f_i(r) \ln f_i(r) + (1-f_i(r)) \ln(1-f_i(r))] \quad \text{equilibrio químico}$$

energía electrostática

3| MORFOLOGÍA VS pH Y CONCENTRACIÓN DE SAL



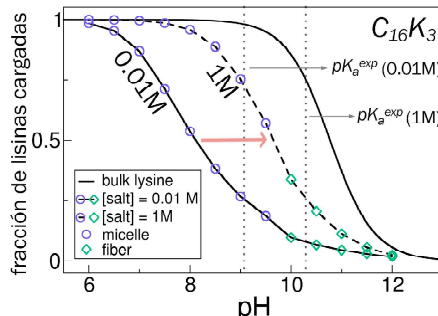
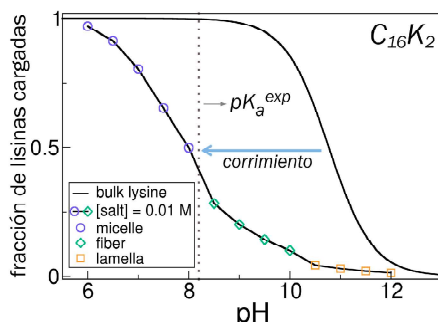
Gao et al observaron micelas a pH = 5.3 and 7.2, fibras a pH = 7.9 y coexistencia de nanocintas planas y fibras a pH = 8.3 y 9.³

buen acuerdo entre predicciones y experimentos

4| REGULACIÓN DE CARGA: CORRIMIENTO DEL pKa

$pK_a(\text{agregado}) < pK_a(\text{bulk})$

El pKa aparente de las lisinas en los agregados es menor al pKa de una lisina en solución. Esto se debe a que la presencia de otras lisinas cargadas desfavorece la protonación.

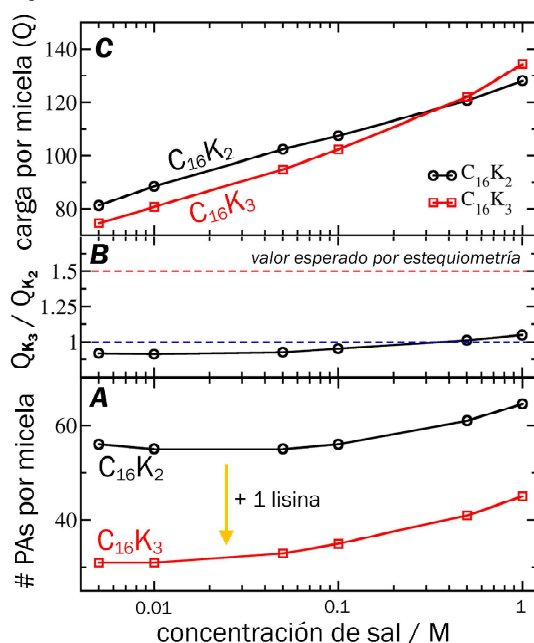


Efecto de la sal:

Al aumentar la [sal], los iones en solución apantallan la carga de las lisinas. Como consecuencia, el corrimiento del pKa por repulsión entre lisinas es menor:

$$pK_a(0.01M) < pK_a(1M) < pK_a(\text{bulk})$$

5| REGULACIÓN DE CARGA POR TAMAÑO



C) aumentar el número de grupos cargados en el PA no garantiza que la carga del agregado sea mayor

B) el aumento de la carga del agregado es menor al esperado por estequiometría

A) el tamaño del agregado disminuye para minimizar repulsiones electrostáticas

6| REFERENCIAS