

## **Simulación de dinámica molecular de la azitromicina con radicales hidroxilo: Nuevos retos en el tratamiento de aguas contaminadas en tiempos de COVID-19**

Angela Emperatriz Centeno-Lopez, Haruna L. Barazorda-Ccahuana\*

Vicerrectorado de Investigación, Universidad Católica de Santa María, Urb. San José  
s/n—Umacollo,

Durante la pandemia de COVID-19 surgió una preocupación por el uso indiscriminado de algunos antibióticos como el macrólido azitromicina. Este fármaco es considerado contaminante orgánico emergente, el problema de este fármaco es la presencia en matrices ambientales y en efluentes de plantas de tratamiento de aguas residuales.

El objetivo principal de este trabajo fue analizar cómo los radicales libres generados por métodos electroquímicos de oxidación avanzada actúan frente al contaminante emergente azitromicina por métodos bioinformáticos y simulaciones computacionales, en la búsqueda de nuevos retos en el tratamiento de aguas contaminadas con antibióticos en tiempos de COVID-19. Para ello, se prepararon sistemas con diferentes concentraciones de azitromicina (50, 75 y 100 moléculas) en soluciones de agua y radicales hidroxilo, cada sistema fue analizado a 293.15 K y 300 K de temperaturas de simulaciones de dinámica molecular durante un tiempo de 10 ns y 100 ns.

Nuestros resultados mostraron el comportamiento de las distintas concentraciones de azitromicina frente a radicales hidroxilo a las dos temperaturas propuestas. Siendo los cálculos a 300 K la más rápida aglomeración de los radicales hidroxilo a la azitromicina.

Este estudio aporta en comprender cómo los radicales hidroxilo a 300 K pueden acelerar la cinética del medio e incrementar la acción de los radicales a las diferentes concentraciones de azitromicina. Por lo tanto vemos que es importante tener en cuenta el efecto de la temperatura en este tipo de modelos de estudio para lograr una óptima degradación por métodos electroquímicos de oxidación avanzada de este tipo de fármaco que actualmente está siendo ampliamente usado para el tratamiento del COVID-19.