



Estudio teórico-experimental de funcionalización de nanotubos de carbono con moléculas biológicas por el método de amidación utilizando diferentes activadores

Kathy Ramírez-Balderrama, Erasmo Orrantia-Borunda, Norma Flores-Holguín.

NANOCOSMOS Virtual Lab, Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C., Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial Chihuahua 31136, Chihuahua, México.

La funcionalización de Nanotubos de Carbono (NTC) mejora la solubilidad, reactividad y biocompatibilidad¹ de estos para ser usados en una gran variedad de aplicaciones². La modificación a través de ácidos genera grupos funcionales de oxígeno como los ácidos carboxílicos los cuales pueden ser activados con diferentes carbodiimidas^{2b} (R-N=C=N-R) para llevar a cabo la formación de enlaces amida con moléculas de interés biológico, además, se aborda el uso de un potencial activador denominado T3P. Se llevaron a cabo estudios tanto teórico como experimental. En el estudio teórico se realizó un análisis de las energías de reacción para determinar la espontaneidad utilizando la Teoría de Funcionales de la Densidad con el funcional B3LYP y el conjunto base 6-31 G (d) en fase acuosa. En el estudio experimental se utilizaron técnicas como Microscopia electrónica de barrido (SEM), Raman y titulación de Bohem para determinar la formación de los grupos carboxilo en el NTC y espectroscopia de fotoelectrones por rayos X (XPS) para determinar la presencia de los grupos amida formados. Los datos obtenidos de forma teórica muestran que las reacciones con las diferentes carbodiimidas se dan de forma espontánea, mientras que con el T3P se requiere de administrarles energía. Por otra parte, los datos experimentales muestran la generación de grupos carboxilo después de haber sido sometidos a un tratamiento ácido (HNO₃/H₂SO₄) y tras las reacciones con los diferentes activadores se obtuvieron formación de enlaces amida en todos los casos. El uso del T3P muestra el mayor porcentaje de nitrógeno, y por lo tanto, una mayor formación de enlaces amida. Con la información obtenida de ambos estudios se puede concluir que existe una novedosa y eficiente alternativa de funcionalización.

1. Bianco, A.; Kostarelos, K.; Prato, M., Making carbon nanotubes biocompatible and biodegradable. *Chem. Commun.* **2011**, 47 (37), 10182-10188.

2.(a) Fu, Y.; Chen, M.; Cui, X.; Wang, L.; Chen, Q.; Zhou, J., Recognition behavior of chiral nanocomposites toward biomolecules and its application in electrochemical immunoassay. *Sci. China Chem.* **2010**, 53 (6), 1453-1458; (b) Jeong, Y. N.; Choi, M. Y.; Choi, H. C., Preparation of Pt- and Pd-decorated CNTs by DCC-activated amidation and investigation of their electrocatalytic activities. *Electrochim. Acta* **2012**, 60, 78-84.