

CONACYT

Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología

EN BÚSQUEDA DE UN MÉTODO VERDE PARA LA FUNCIONALIZACIÓN DE NANOTUBOS DE CARBONO



Kathy A. Ramírez Balderrama, Erasmo Orrantia Borunda, Norma R. Flores Holguín

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

INTRODUCCIÓN

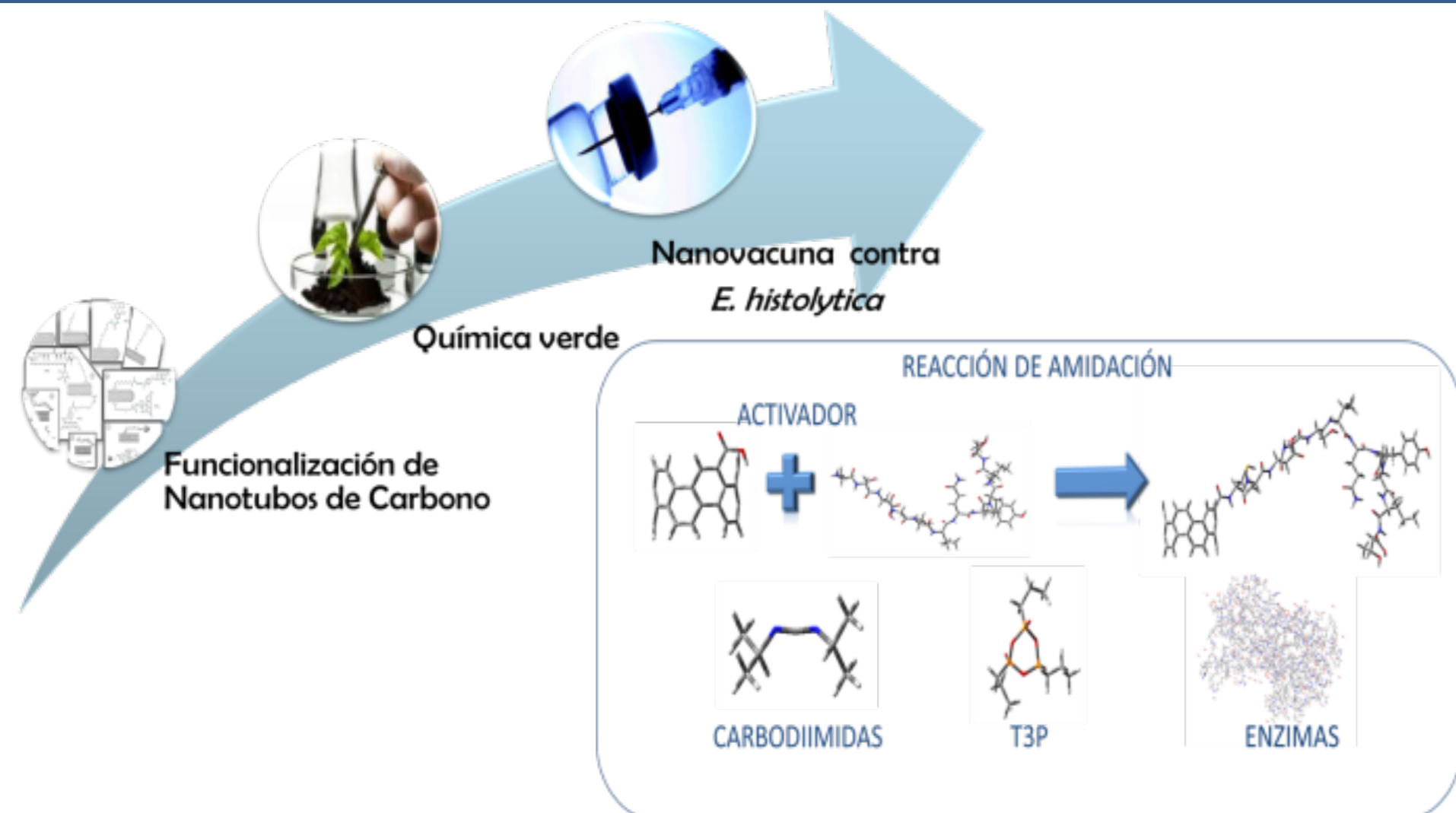


figura 1. Proceso general de funcionalización de NTC a través de una reacción de amidación para la generación de una nanovacuna contra *E. histolytica*.

Los Nanotubos de carbono (NTC) (Iijima,1991), son considerados acarreadores biológicos ya que logran viajar hacia espacios intracelulares de forma específica. Para su aplicación es necesario la modificación de su estructura anclando a ella diferentes moléculas de interés, con esta modificación se logra disminuir la toxicidad (Smart et al., 2006), se mejora la biocompatibilidad para diferentes aplicaciones biológicas entre las cuales destacan su uso como biosensores, marcadores fluorescentes, fármacos, terapia contra cáncer, terapia génica entre otros (García Villa et al., 2011; Tam et al., 2009; Amirí et al., 2012). Sin embargo, estos procesos de modificación denominados funcionalización se logra mediante reacciones que en muchos casos conllevan más de un paso generando con ellos residuos peligrosos, el impacto negativo de estas sustancias se va agravando cuando son difíciles de degradar en la naturaleza. Por consiguiente es necesario como primer medida, disminuir la generación de estas sustancias aplicando la “química verde” en los procesos de producción. En la presente investigación se evalúan la modificación de NTC empleando un estudio teórico como primer acercamiento para lograr disminuir el uso de reactivos de forma innecesaria al realizar la parte experimental, además se propone el uso de reactivos que sean más amigables con el medio ambiente para lograr la funcionalización.

METODOLOGÍA

La realización del estudio teórico se llevó a cabo empleando Gaussian 09 con un visualizador gráfico Gauss View 5.0. Se utilizó DFT con el funcional B3LYP y el conjunto de base 6-31G (d). Se obtuvieron energías de formación de las reacciones de amidación utilizando las diferentes carbodiimidas y el T3P. Por otra parte se usó el programa AutoDock para identificar los acoplamientos tanto del NTC como del péptido propuesto con diferentes enzimas de tipo ligasa (figura 2).

La parte experimental (figura 3) se encuentra en desarrollo para corroborar los datos teóricos obtenidos. Hasta el momento se ha realizado la síntesis de NTC en el laboratorio de materiales Nanoestructurados por la técnica de Spray pirolisis empleando ferroseno y tolueno como catalizador y fuente de carbono respectivamente. Después se realizó el tratamiento de purificación con una mezcla de HNO₃/ H₂SO₄ (Kumar et al., 2012) para generar los grupos funcionales de oxígeno y se caracterizaron para comprobar su presencia en el NTC, se analizaron antes y después de la purificación mediante Raman, MEB y espectroscopia infrarroja. Actualmente se está trabajando en la reacción de amidación entre el NTC y el péptido propuesto.

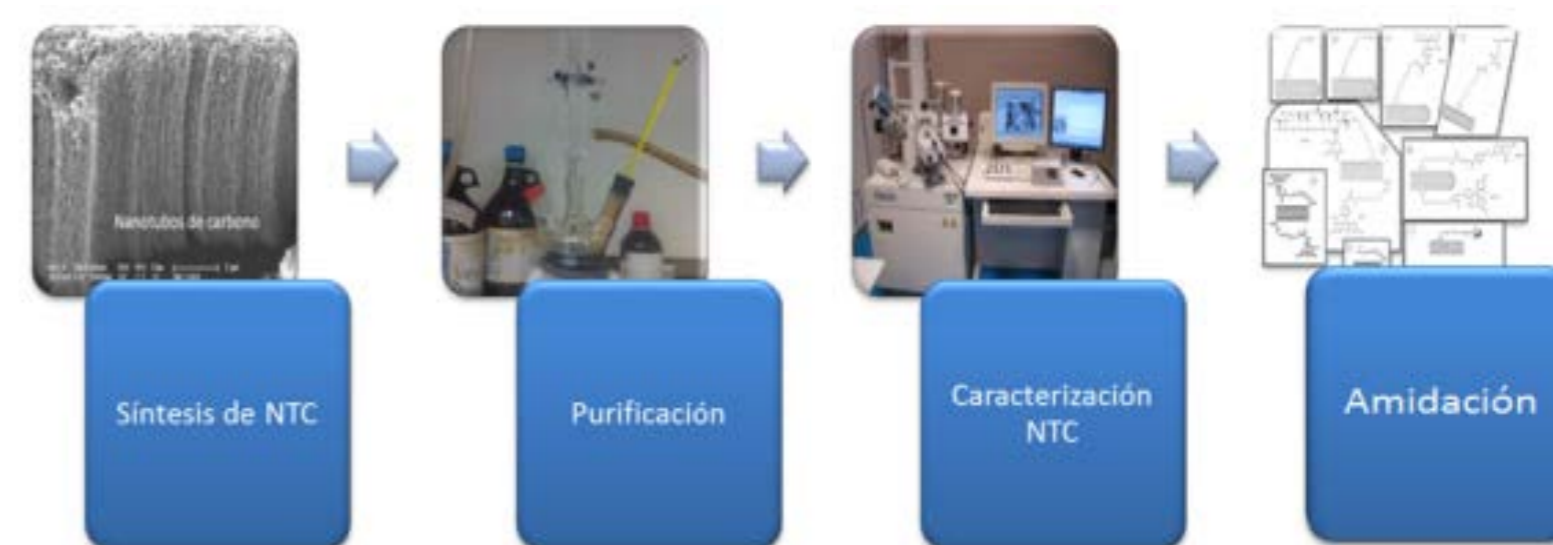
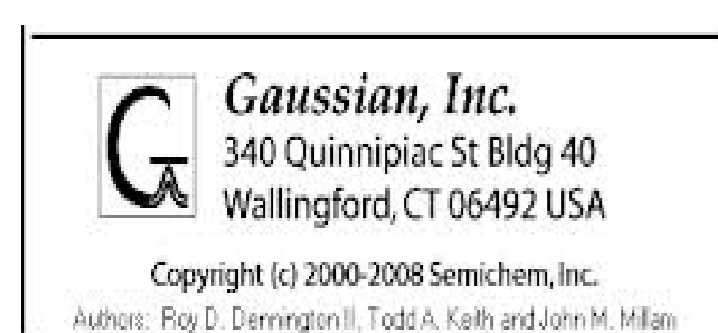


figura 2. Programas utilizados para el estudio teórico de la funcionalización de NTC.

figura 3. Proceso experimental para la funcionalización de NTC

RESULTADOS

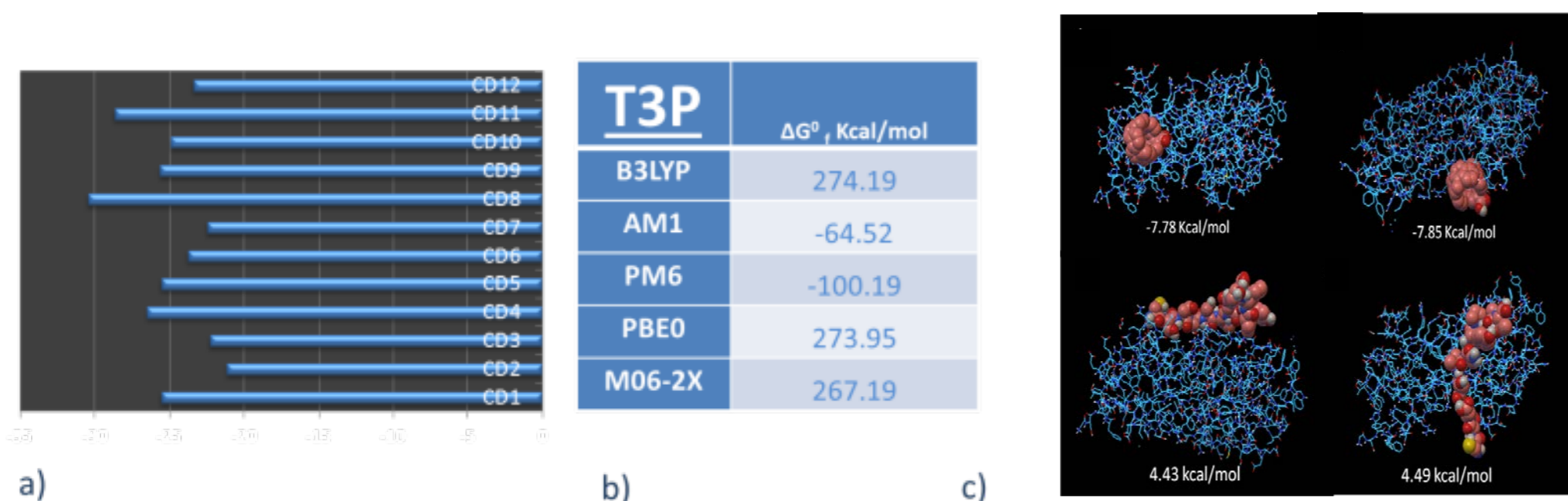


figura 3. a) Energías de formación utilizando las carbodiimidas como activadores; b) Energías de formación empleando T3P como activador; c) Energías de enlace entre NTC-Enzima y Péptido-Enzima.

De acuerdo a los datos teóricos obtenidos la energía de reacción de las carbodiimidas estudiadas (figura 3a) son procesos espontáneos. Sin embargo, el uso del T3P (figura 3b) en la reacción de amidación no conlleva a obtener una reacción espontánea. Por último el uso de enzimas como activador (figura 3c) no es posible ya que si bien existe una interacción NTC-enzima no se da en el sitio activo, mientras que el péptido no tiene afinidad de unirse a esta enzima.

Los NTC de carbono sintetizados se muestran en la figura 4a. La caracterización antes y después del tratamiento de purificación se llevó a cabo para su posterior análisis. Se observa la presencia de grupos funcionales de oxígeno mediante la interpretación del IR (figura 4b). En las figuras 5 y 6 se muestra el análisis por medio de MEB y Raman, se observa que la dispersión mejora con el tratamiento de purificación mientras que la composición denota la presencia de oxígeno. También es conocido que la purificación genera defectos en el NTC los cuales son comprobados por medio de Raman.

CONCLUSIONES

Las carbodiimidas estudiadas pueden ser buenos candidatos como activadores para llevar a cabo la reacción de amidación, sin embargo, el uso de estas dependerá de la disposición y precio. El uso del T3P no es favorable a condiciones normales de temperatura, presión y PH, por consiguiente para llevar a cabo la reacción de amidación es necesario variar las condiciones antes mencionadas. La enzima se adsorberá sobre la superficie del NTC, mientras que el péptido propuesto no tiene afinidad de unirse a esta enzima.

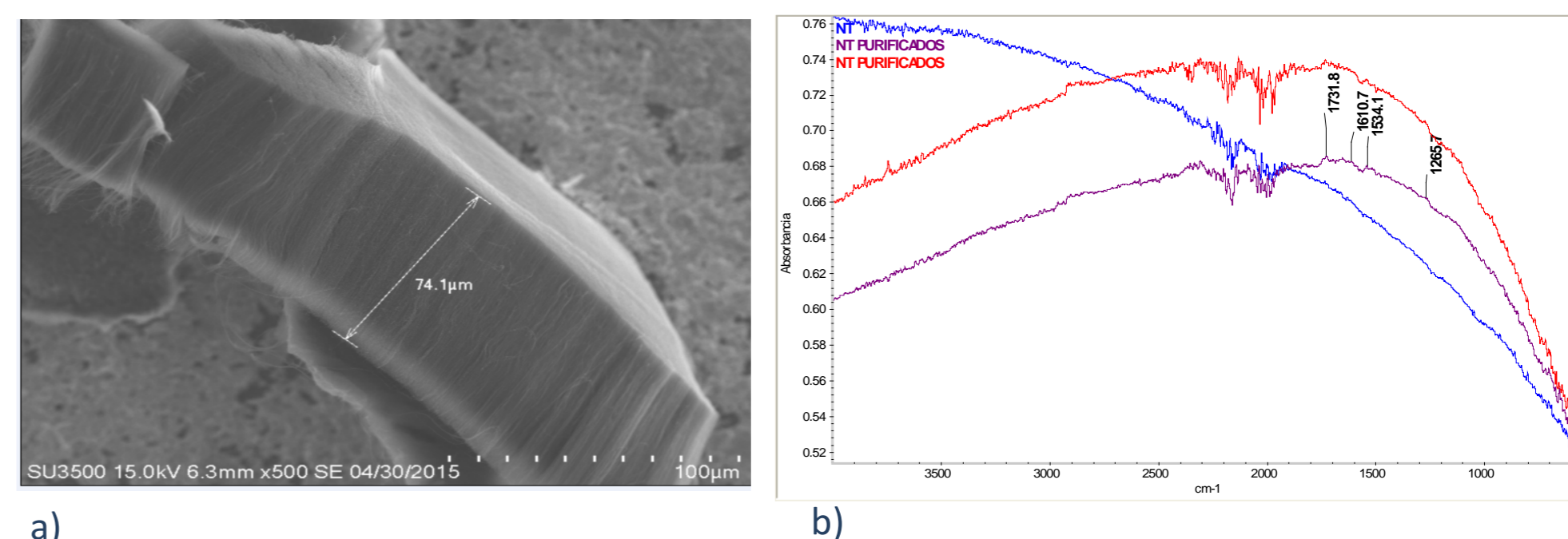


figura 4. a) NTC sintetizados por spray pirolisis; b) IR de NTC antes y después de la purificación.

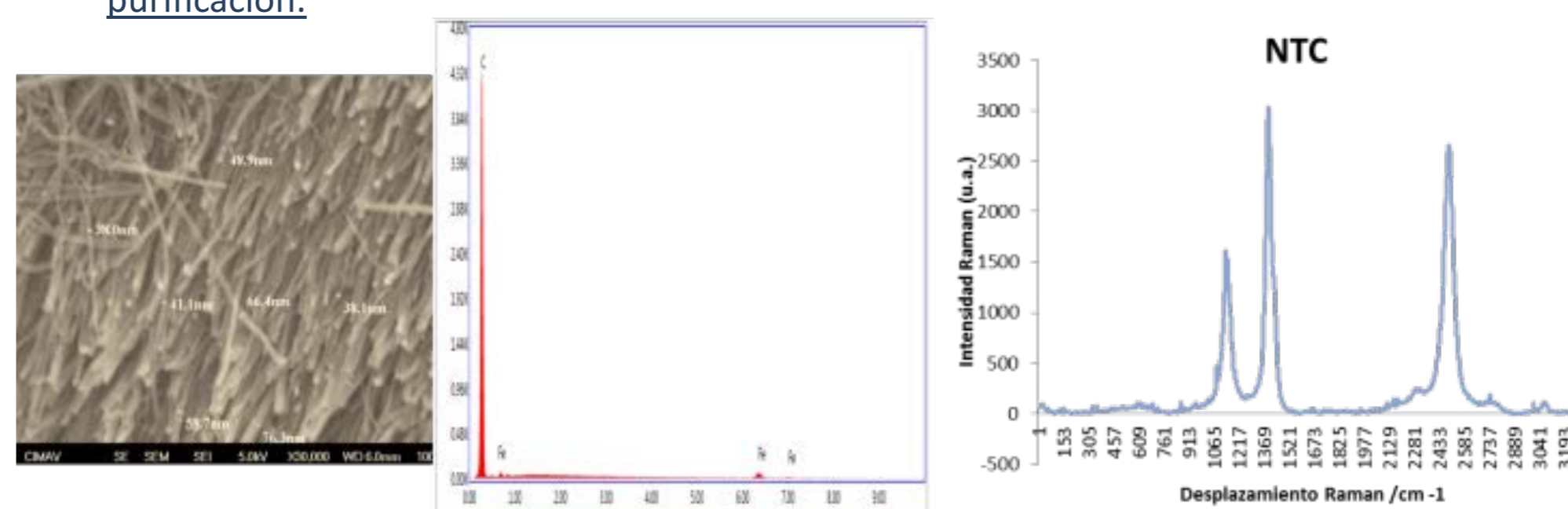


figura 5. Morfología, composición y Raman de NTC sintetizados.

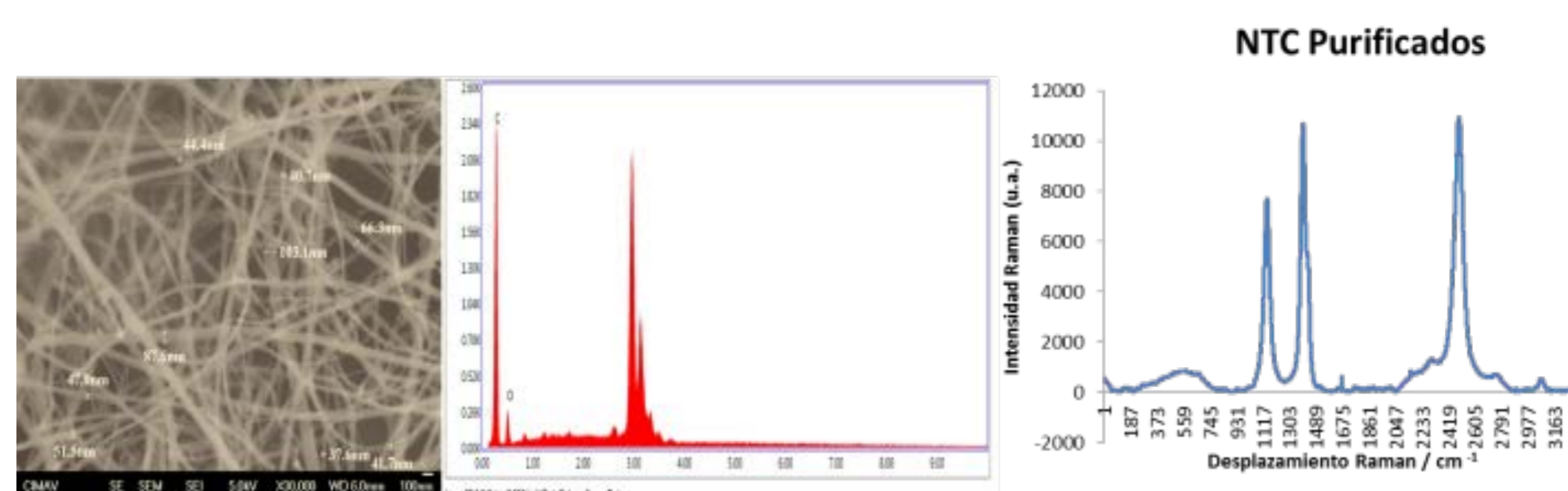


figura 6. Morfología, composición y Raman de NTC purificados.

REFERENCIAS

- Amirí, A., Zardini, H.Z., Shanbedi, M., Maghrebi, M., Baniadam, M., Toleinia, B., (2012). Efficient method for functionalization of carbon nanotubes by lysine and improved antimicrobial activity and water-dispersion. *Materials Letters*, 72, 153-156.
- García Villa, M., Jiménez-Jorquera, C., Haro, I., Gomara, M.J., Sanmartí, R., Fernández-Sánchez, C., Mendoza, E., (2011). Carbon nanotube composite peptide-based biosensors as putative diagnostic tools for rheumatoid arthritis. *Biosensors and Bioelectronics*, 27, 113-118.
- Iijima, S., (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature (London)* 56, 354.
- Smart, S.K., Cassidy, A.I., Lu, G.Q., Martin, D.J., (2006). The biocompatibility of carbon nanotubes. *Carbon*, 44, 1034-1047.
- Kumar, S., Kaur, I., Dharamvir, K., Bharadwaj, L.M., (2012). Controlling the density and site of attachment of gold nanoparticles onto the surface of carbon nanotubes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 369, 23-27.
- Tam, P.D., Hieu, N.V., Chien, N.D., Le, A.T., Tuan, M.A., (2009). DNA sensor development based on multi-wall carbon nanotubes for label-free influenza virus (type A) detection. *Journal of Immunological Methods*, 350, 118-124.

AGRADECIMIENTOS

Centro de Investigación de Materiales Avanzados, S.C.
Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca otorgada NANOCOSMOS por el espacio que se otorga para poder realizar el proyecto Dra. Norma Flores Holguín y Dr. Erasmo Orrantia Borunda por todo su apoyo

