



## NANOTUBO DE NITRURO DE BORO (20,0) ENCAPSULANDO A DIFERENTES FÁRMACOS

María del Rosaro Melchor Martínez<sup>1</sup> y Dolores García Toral<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. rosariomelchor.m@gmail.com

Los cálculos de primeros principios son hoy en día una herramienta esencial para el modelado de estructuras nanométricas. Siguiendo el criterio de mínima energía total, a través de la funcional BLYP<sup>1</sup> y función de base 6-31g(d) implementada por el código de química cuántica Gaussian 09<sup>2</sup> se reportan las propiedades electrónicas, tales como, el gap (HOMO-LUMO), potencial químico, momento dipolar, función de trabajo y energía de adsorción del nanotubo de nitruro de boro (BNNT) con quiralidad (20,0) y su interacción por las paredes internas con los fármacos: cafeína ( $C_8H_{10}N_4O_2$ ), norepinefrina ( $C_8H_{11}NO_3$ ) y primidona ( $C_{12}H_{14}N_2O_2$ ); (BNNT-Cafeína, BNNT-Norepinefrina y BNNT-Primidona). Los resultados de la simulación nos indican que la adsorción es de tipo física para los sistemas BNNT-Norepinefrina y BNNT-Primidona con una energía de interacción de -0.32 y -0.07 eV respectivamente, mientras que para el sistema BNNT-Cafeína tiene un valor de 0.5 eV, indicando que la posición geométrica no es la óptima para el transporte de fármacos, por lo que se realiza actualmente la simulación de la interacción de la molécula de cafeína por las paredes externas del BNNT. Además se muestran compresiones y expansiones ligeras en el diámetro del BNNT de los sistemas BNNT-Norepinefrina y BNNT-Primidona, siendo más notorias en el sistema BNNT-Cafeína, en comparación con el diámetro del BNNT original (1.129 nm).

1. Lee C., Yang W., Parr R. G., Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density, Phys. Rev. B. 1988, 37, 785-789.
2. Frisch M., Trucks G., Schlegel H., Scuseria G., et al. (2009) Gaussian 09, Revision C.01.