



## INTERACCIÓN DE DOPAMINA, EFEDRINA Y FENITOÍNA SOBRE LA PARED INTERNA DEL NANOTUBO DE NITRURO DE BORO (20,0)

José Cano Ordaz<sup>1</sup> y Dolores García Toral<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. cano.jose3b@gmail.com

Por medio de simulación molecular se emplea la DFT a nivel de la funcional BLYP<sup>1</sup> con función de base de valencia dividida 6-31 g (d) para analizar el cambio en las propiedades estructurales, electrónicas y fisicoquímicas del nanotubo de nitruro de boro (BNNT) con quiralidad (20,0) o estructura zig-zag al mantener una interacción con las moléculas Dopamina (DA), Efedrina (EFD) y Fenitoína (FNT), de composiciones químicas  $C_8H_{11}NO_2$ ,  $C_{10}H_{15}NO$  y  $C_{15}H_{12}N_2O_2$  respectivamente.

La optimización geométrica de las nanoestructuras y moléculas se hizo siguiendo el criterio de la mínima energía, considerando carga neutra y multiplicidad 1, con una configuración de interacción donde el interior del BNNT encapsula las moléculas farmacéuticas. Los cálculos de primeros principios de energía total muestran una energía de adsorción molecular para los complejos BNNT-DA, BNNT-EFD y BNNT-FNT en fase gas de -0.35, -0.13 y 0.27 eV, respectivamente. Además resultados de la simulación arrojan que los sistemas presentan alta polaridad, 26.1, 24.43 y 24.94 D, respectivamente. Producto de la interacción los diámetros de los tubos presentan una ligera expansión en el eje "y", mientras que en el eje "z" se observa el efecto contrario, comparadas con respecto al valor del diámetro de 1.129 Å del BNNT original. Se obtuvieron parámetros cuánticos tales como brecha HOMO-LUMO (gap), potencial químico ( $\mu$ ), momento dipolar y función de trabajo ( $WF$ ), los cuales están enfocados a establecer parámetros que indiquen la viabilidad en el uso de los BNNTs en el campo de la tecnología biomédica, con una posible aplicación como nanovehículo de fármacos.

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.