



RENIECYT - LATINDEX - Research Gate - DULCINEA - CLASE - Sudoc - HISPANA - SHERPA UNIVERSIA - E-Revistas - Google Scholar DOI - REBID - Mendeley -
 DIALNET - ROAD - ORCID

Title: Radicales libres en medio ambiente y salud

Author: Annik VIVIER-JÉGOUX

Editorial label ECORFAN: 607-8324
 BCIE Control Number: 2016-01
 BCIE Classification (2016): 221116-0101

Pages: 75
 RNA: 03-2010-032610115700-14

ECORFAN-México, S.C.

244 – 2 Itzopan Street
 La Florida, Ecatepec Municipality
 Mexico State, 55120 Zipcode
 Phone: +52 1 55 6159 2296
 Skype: ecorfan-mexico.s.c.
 E-mail: contacto@ecorfan.org
 Facebook: ECORFAN-México S. C.
 Twitter: @EcorfanC

www.ecorfan.org

Holdings

Bolivia	Honduras	China	Nicaragua
Cameroon	Guatemala	France	Republic of the Congo
El Salvador	Colombia	Ecuador	Dominica
Peru	Spain	Cuba	Haití
Argentina	Paraguay	Costa Rica	Venezuela
Czech Republic			

Contaminación

IMECA

Niveles de ozono

Radiación ultravioleta

Capa de ozono

Enfermedades neurodegenerativas

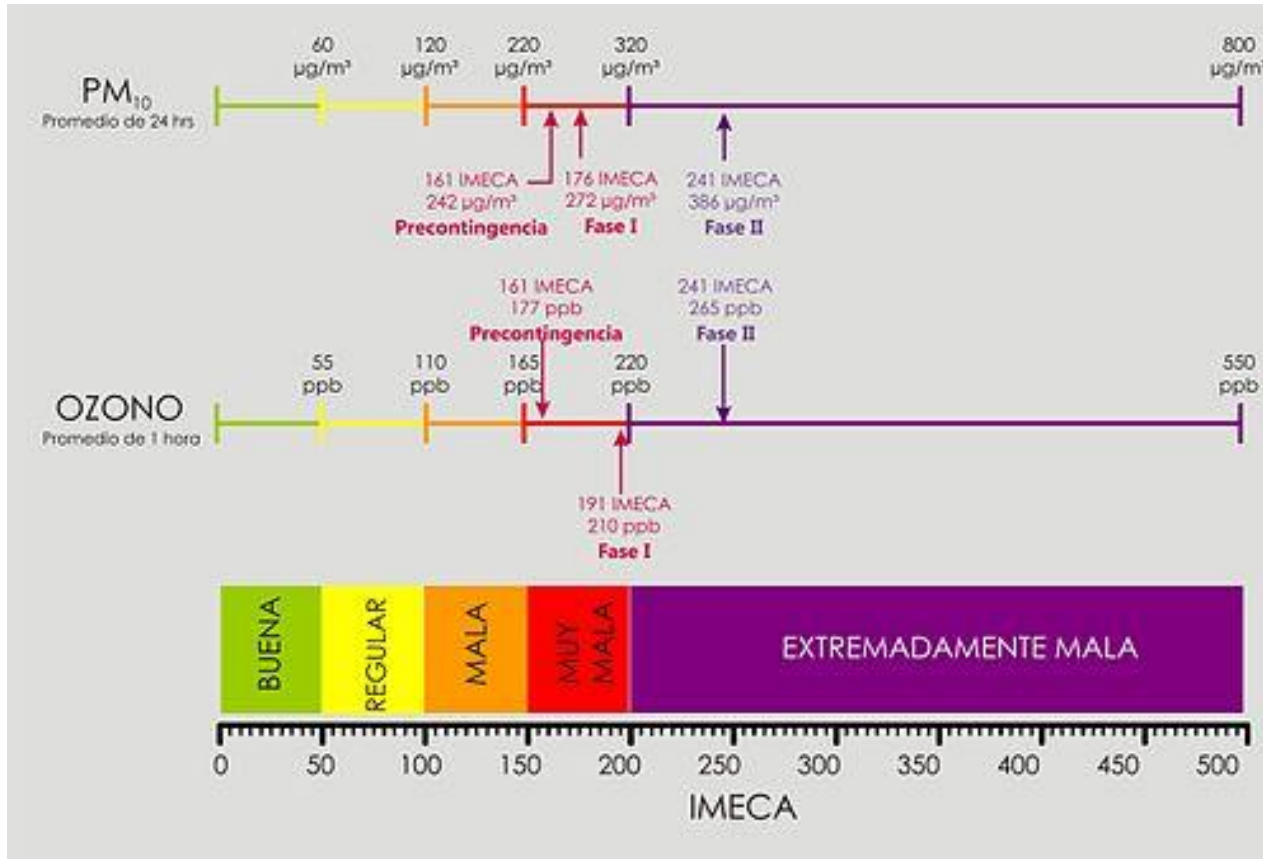
Estrés oxidativo

Antioxidantes

IMECA

Índice Metropolitano de Calidad del Aire

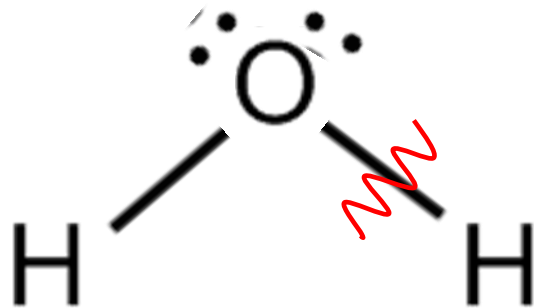
Dirección de Monitoreo Atmosférico de la Ciudad de México



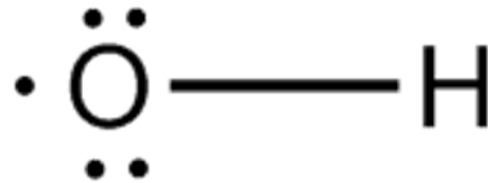
- Ozono
- Dióxido de Azufre
- Dióxido de Nitrógeno
- Monóxido de Carbono
- Partículas

¿Qué son los Radicales Libres?

- Especies químicas muy reactivas que tienen electrones no apareados.
- La mayoría de los radicales libres tienen un número impar de electrones.



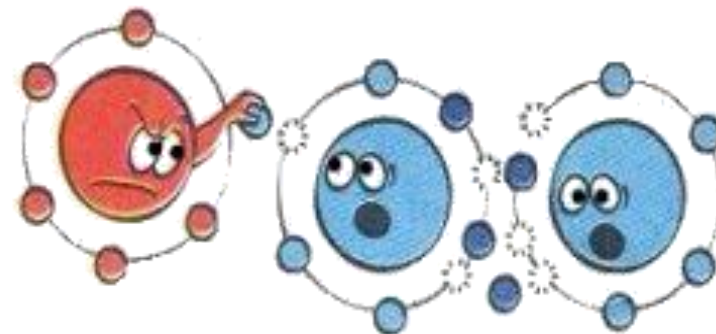
10 electrones



9 electrones



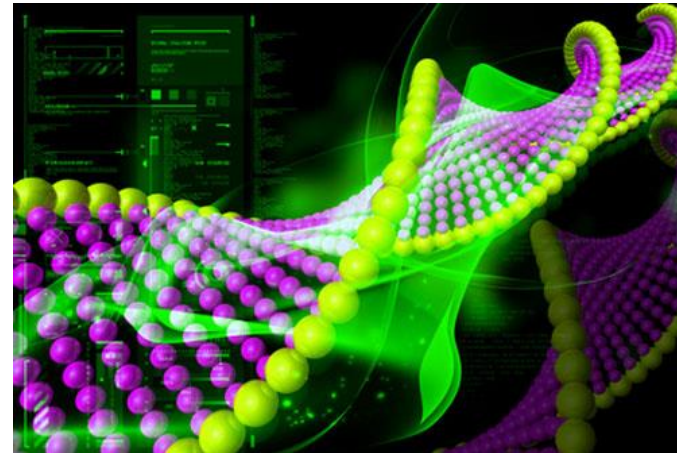
1 electrón



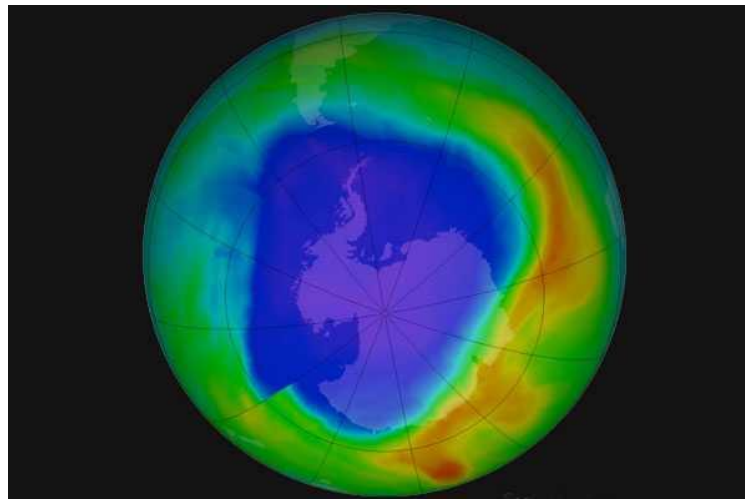
Radicales Libres en:



Medio Ambiente



Sistemas Biológicos



Capa de Ozono

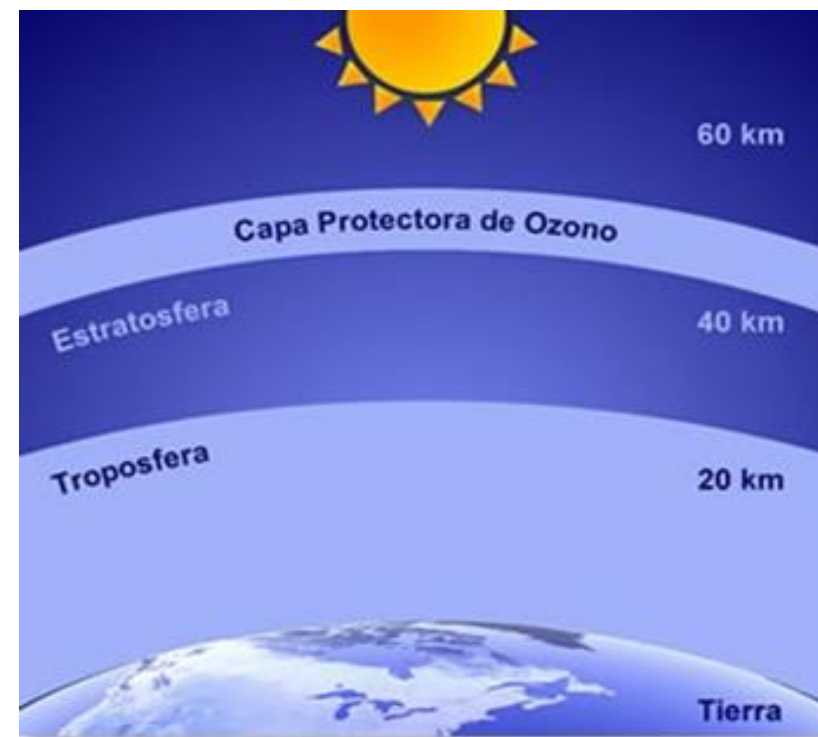
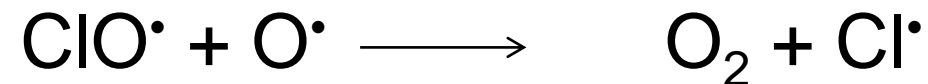
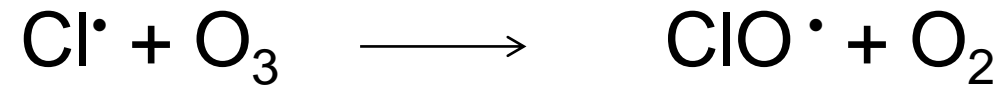
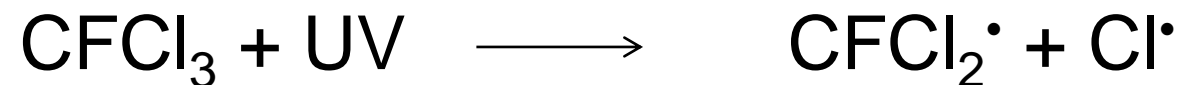
Capa de Ozono

El ozono absorbe 97-99% UVB entre 200 y 315 nm.

Descubierta en 1913 Fabry y Buisson.

Entre 1928 y 1958, Dobson instaló una red mundial de estaciones de monitoreo.

Clorofluorocarbonos (CFC):



$[\text{O}_3] < 10 \text{ ppm}$

Gasolinas sin plomo

- 1990's. Eliminación paulatina del tetraetil plomo a nivel mundial debido a la gran toxicidad del plomo (Sustituye al Ca, Fe y Zn en las enzimas. La acumulación de plomo en el cerebro produce saturnismo).
- 1991. Primeras gasolinas sin plomo en México.
- Rediseño de las gasolinas con compuestos aromáticos, en particular el tolueno.
- Gran incremento del ozono troposférico.

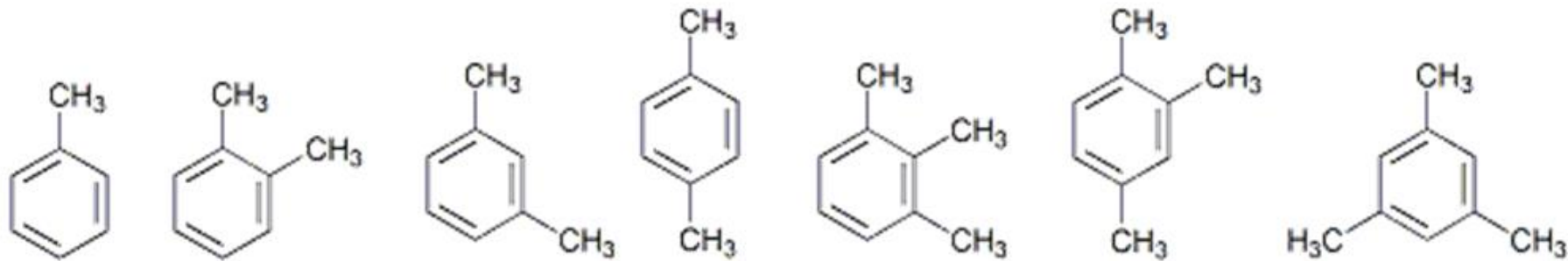


Antecedentes


- IMP – Dra. María Esther Ruiz Santoyo, Directora de Investigación
- Isidoro García Cruz y Víctor Uc Rosas – Estudio **a nivel molecular** de la reacción del tolueno con OH



Tolueno, Xilenos, Trimetilbencenos

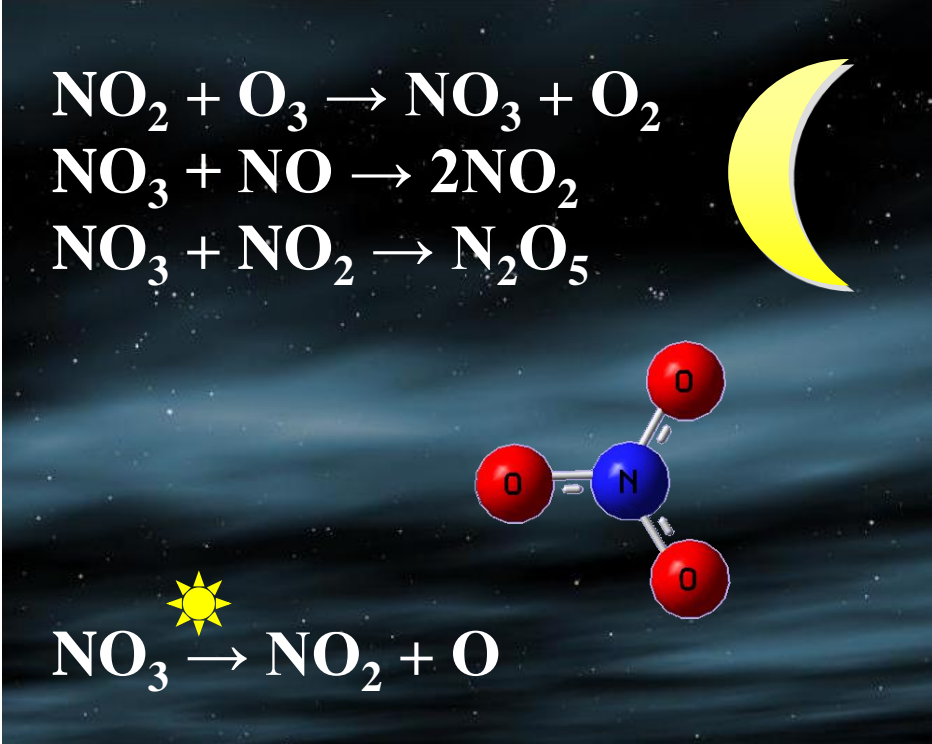


Como se forman los radicales $\text{OH}\cdot$ y $\cdot\text{NO}_3$



$$\text{O}_3 + h\nu \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}(^1\text{D})$$
$$\text{O}(^1\text{D}) + \text{M} \rightarrow \text{M} + \text{O}(^3\text{P})$$
$$\text{O}(^1\text{D}) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{OH}$$

“el detergente”
de la atmósfera diurna

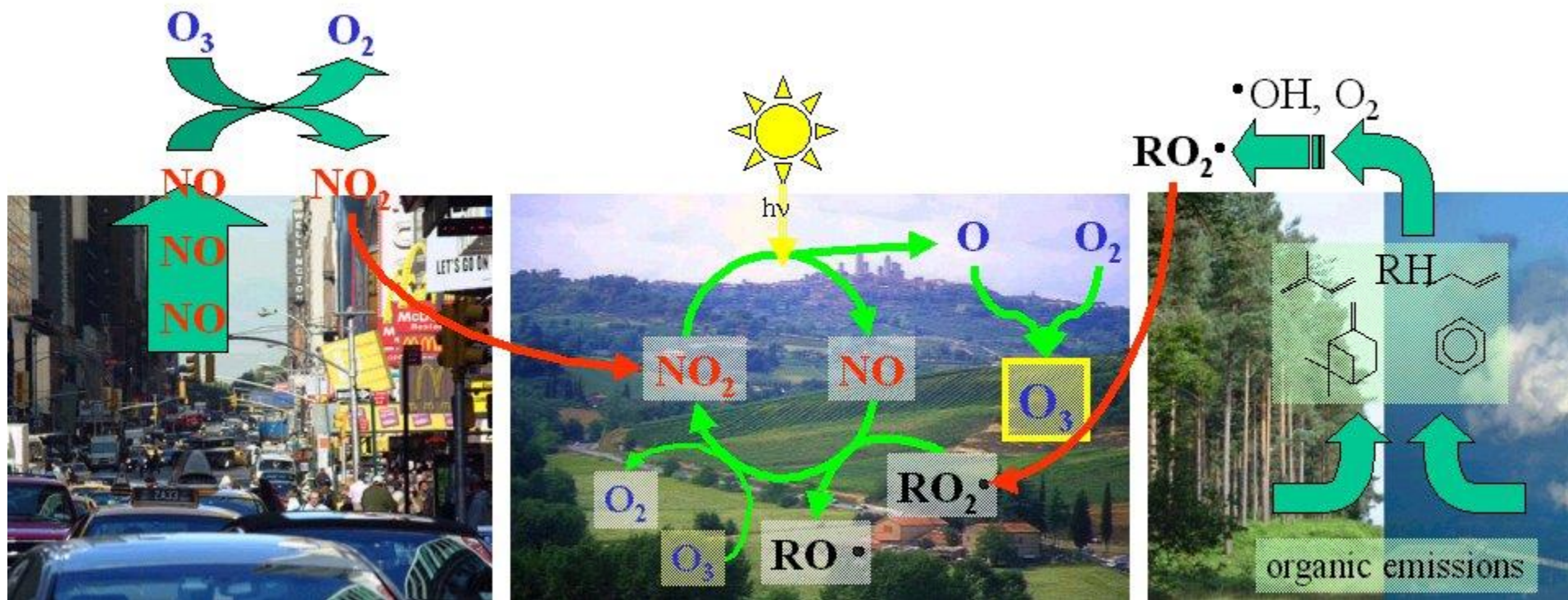


$$\text{NO}_2 + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_3 + \text{O}_2$$
$$\text{NO}_3 + \text{NO} \rightarrow 2\text{NO}_2$$
$$\text{NO}_3 + \text{NO}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{O}_5$$

$$\text{NO}_3 \xrightarrow{\text{sun}} \text{NO}_2 + \text{O}$$

En la tropósfera, durante el día, los compuestos orgánicos volátiles (COV) son convertidos en radicales $\text{R}\cdot$ a través de su reacción con radicales $\text{OH}\cdot$. La generación de radicales $\text{OH}\cdot$ proviene principalmente de la fotólisis del ozono.

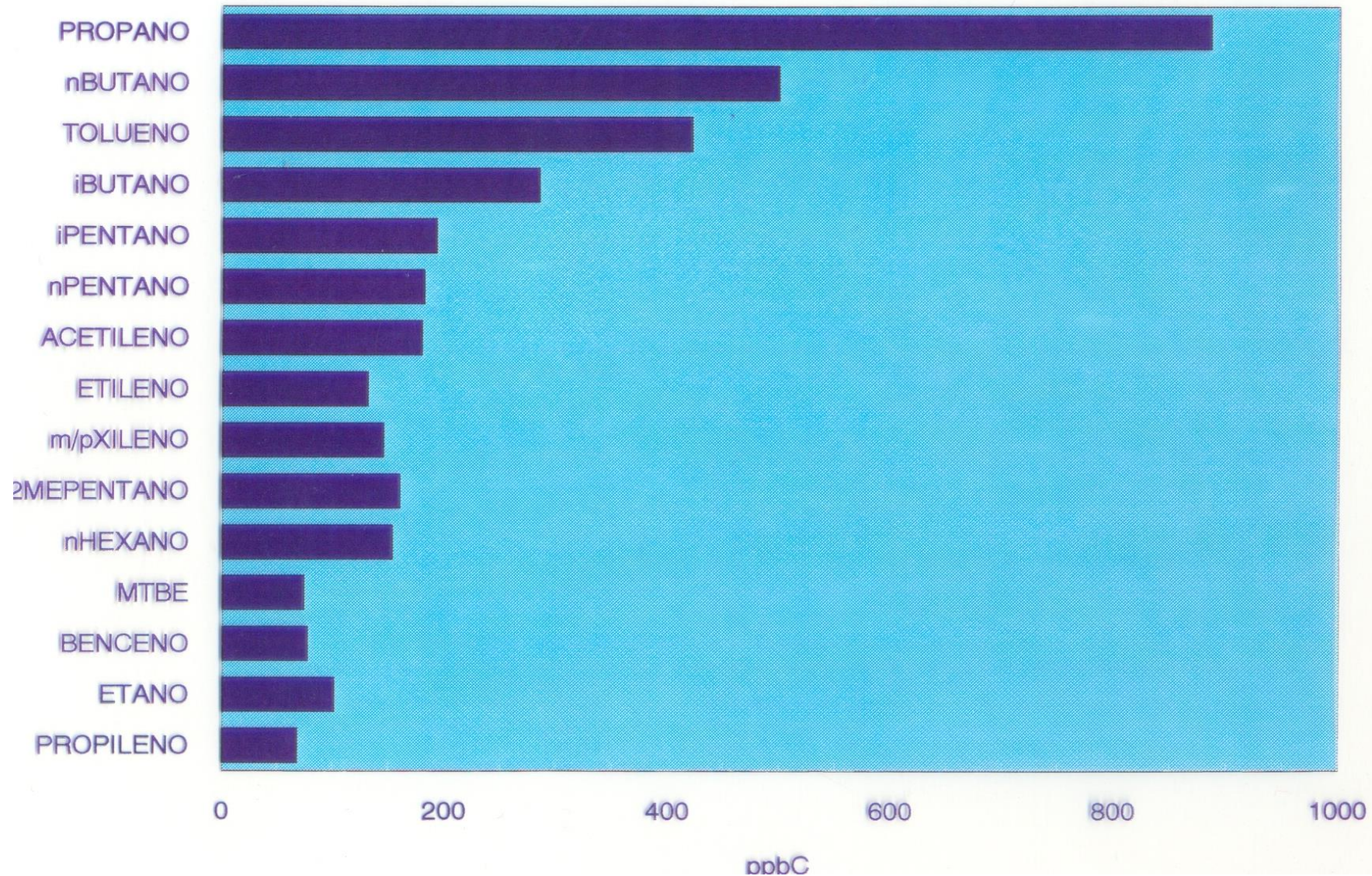
Radicales libres en el aire



Vidas medias en presencia de los principales agentes oxidantes

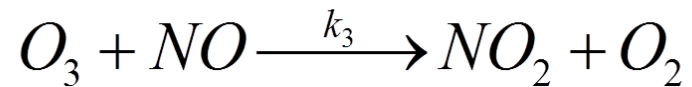
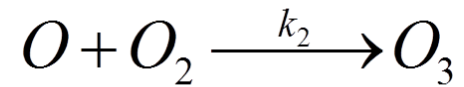
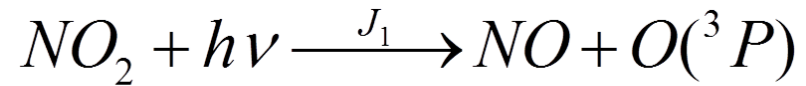
Contaminante	O ₃	OH·	NO ₃ ·
n-Butano	≥ 650 años	11 h	29 días
Tolueno	≥ 200 días	4.5 h	33 días
Formaldehído	≥ 3200 años	3.1 h	1.8 días

Hidrocarburos más abundantes en el aire de la Ciudad de México

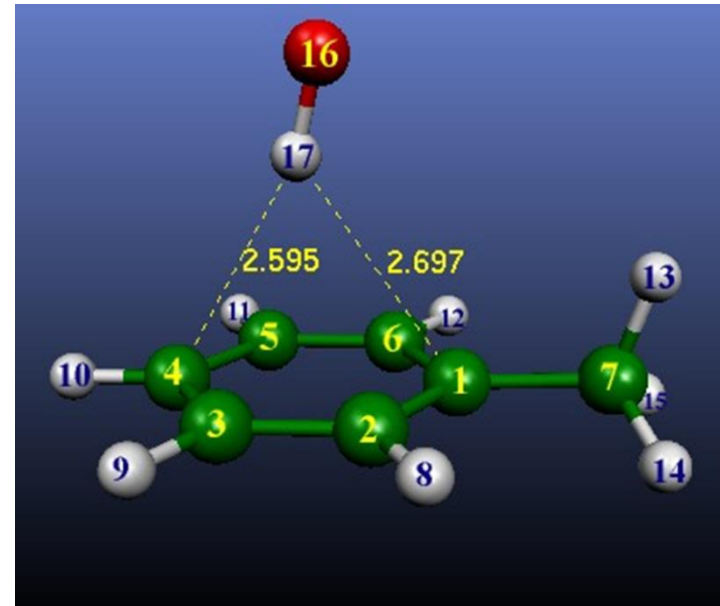
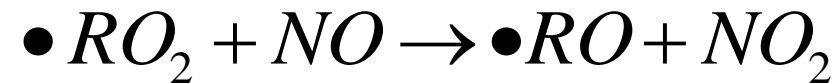
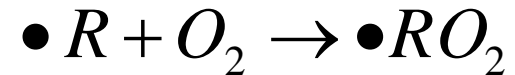
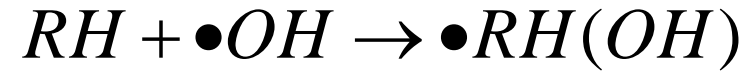
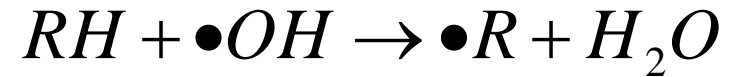


Formación de Ozono en la Tropósfera

Ciclo fotoestacionario del ozono:



$$[O_3] = \frac{J_1[NO_2]}{k_3[NO]}$$

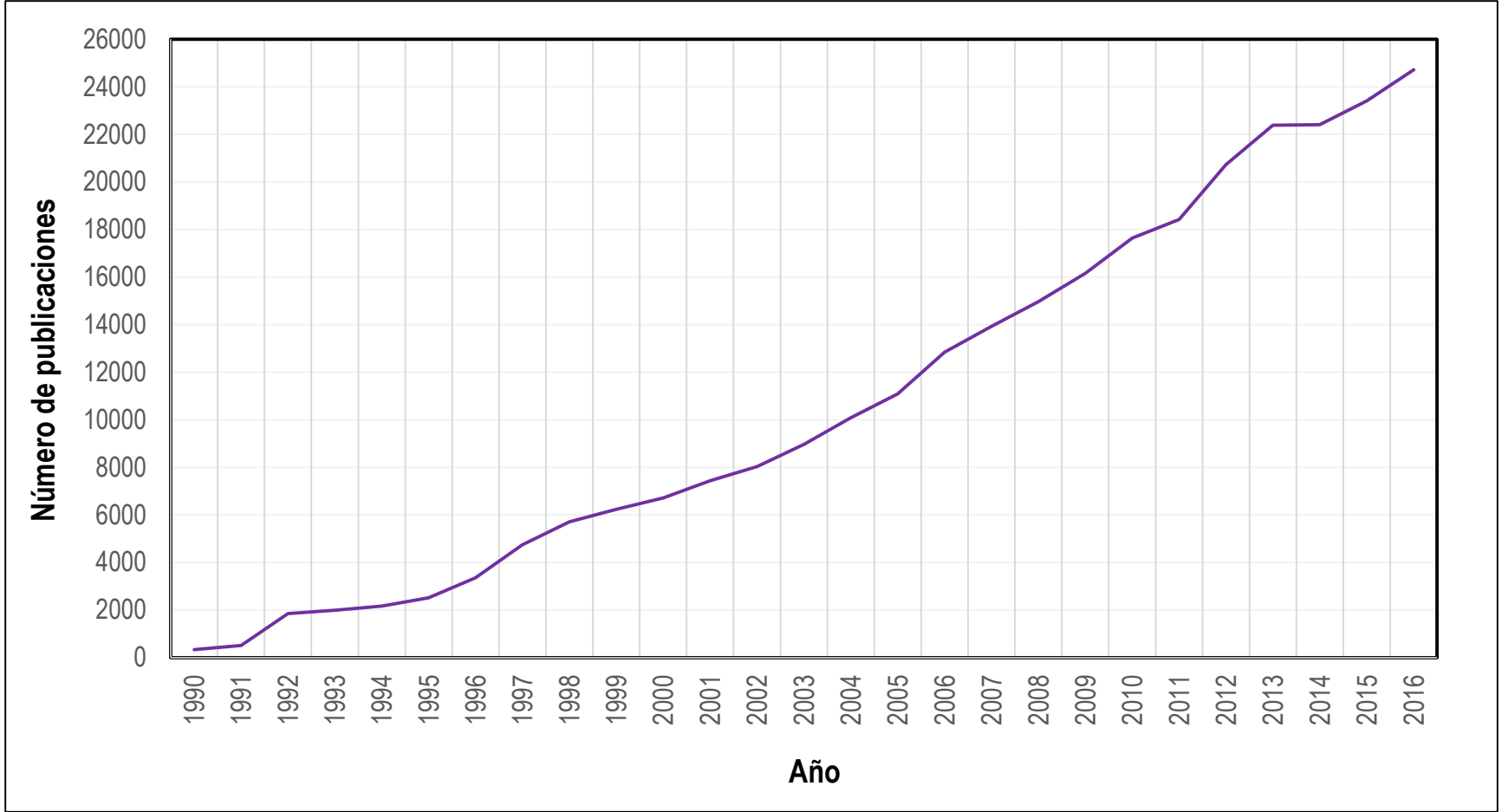


Química Cuántica Computacional

La química cuántica computacional es una herramienta poderosa para el estudio del mecanismo y la cinética de reacciones químicas a nivel molecular.

Hace algunos años...

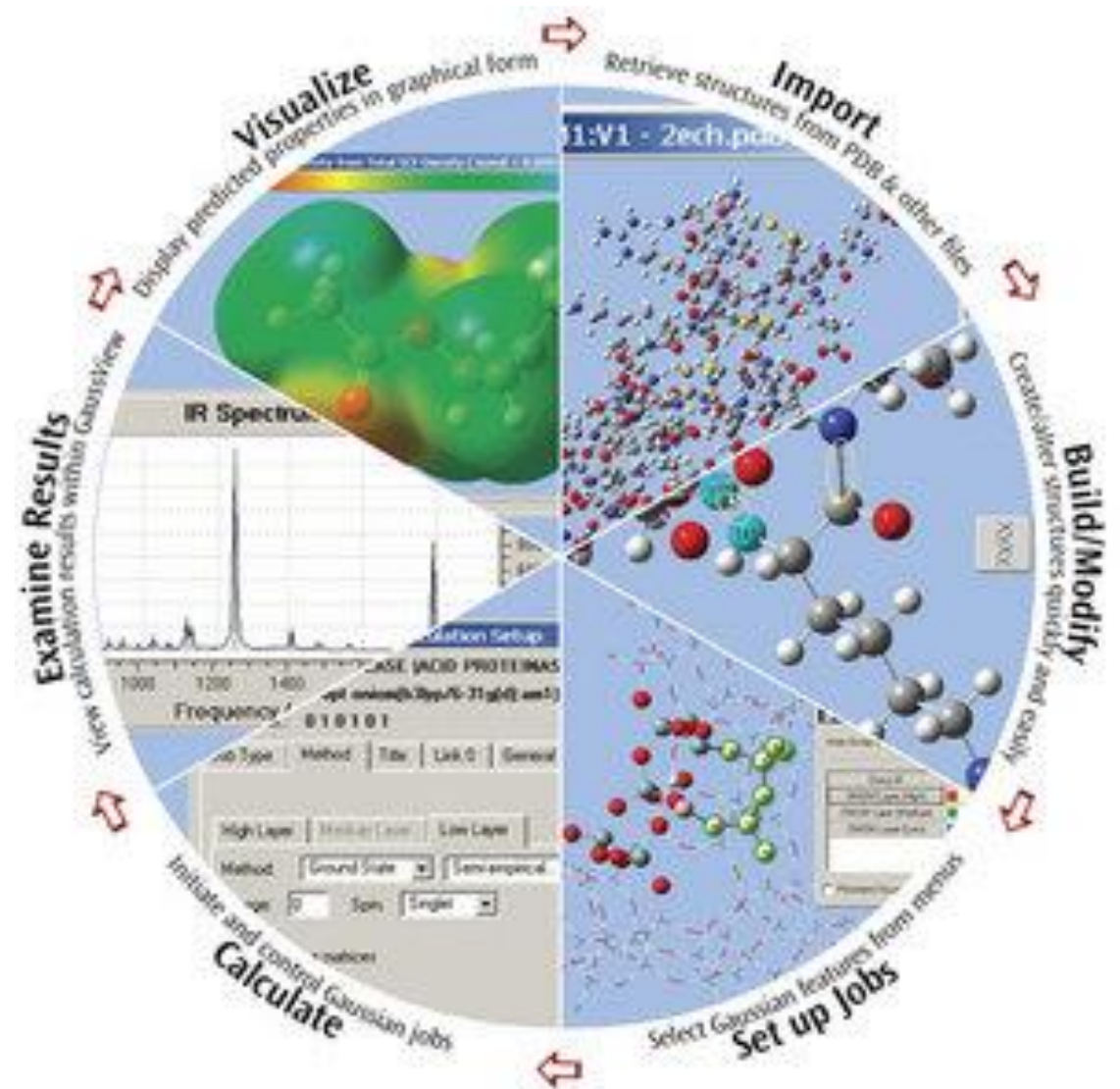




Cálculos de Química Cuántica y Cinética Computacional



Aitzaloa

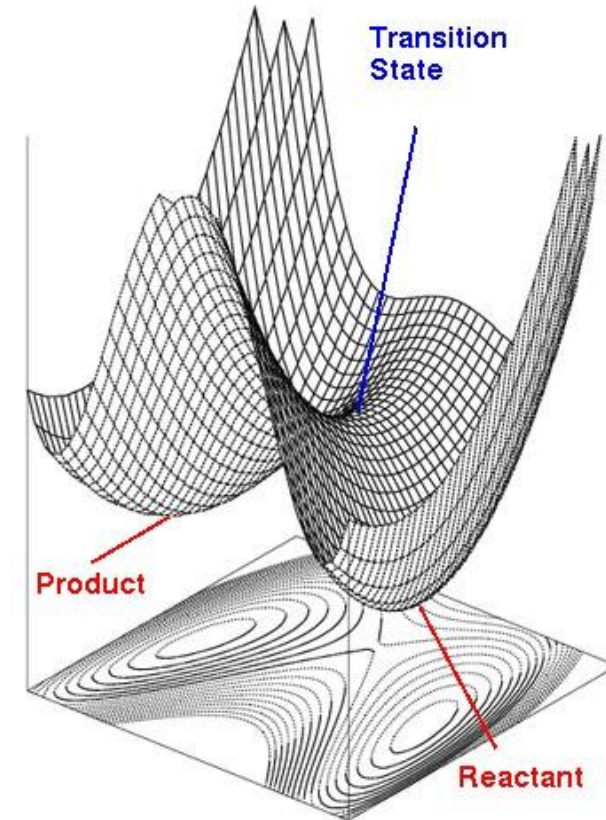


Superficies de energía potencial

Los métodos computacionales se basan en el cálculo de las **Superficies de Energía Potencial (SEP)** de las moléculas.

De la Superficie de Energía Potencial se puede derivar información estructural y química de la molécula.

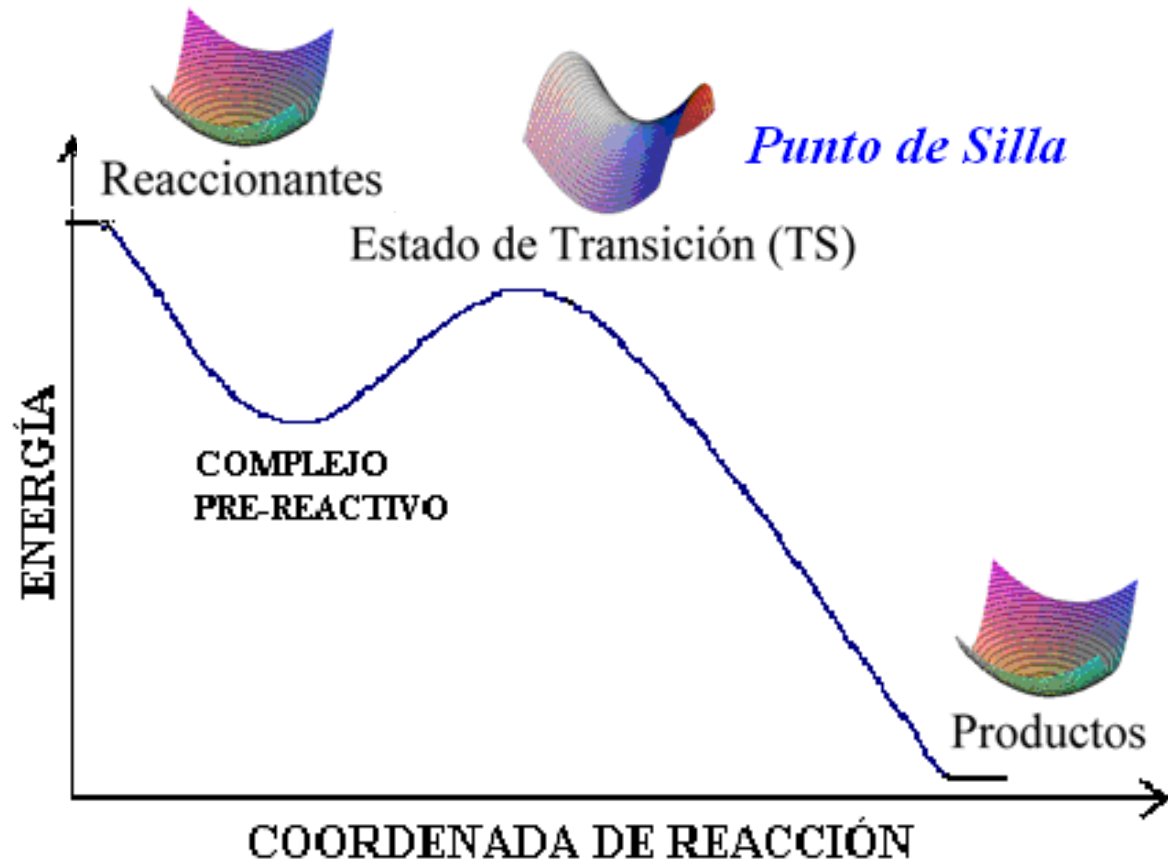
Los diferentes métodos computacionales difieren en el modo en el cual la superficie se calcula y como se derivan las propiedades moleculares de esta.



Cálculo Teórico de Constantes de velocidad utilizando cinética computacional

$$k = \sigma \kappa \frac{k_B T}{h} e^{-(\Delta G^\ddagger)/RT}$$

Reacciones entre radicales libres y moléculas neutras. Perfil de reacción.

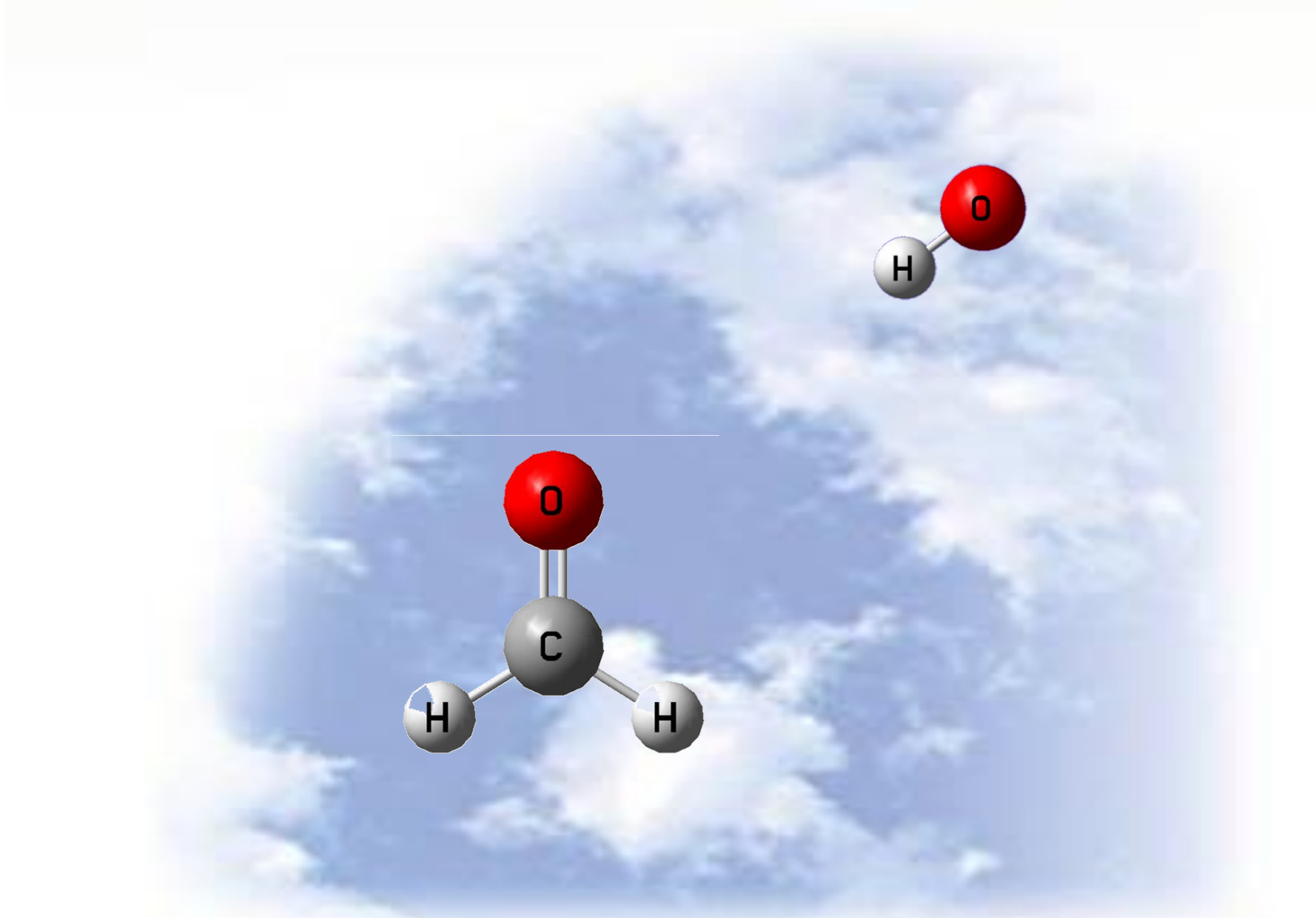




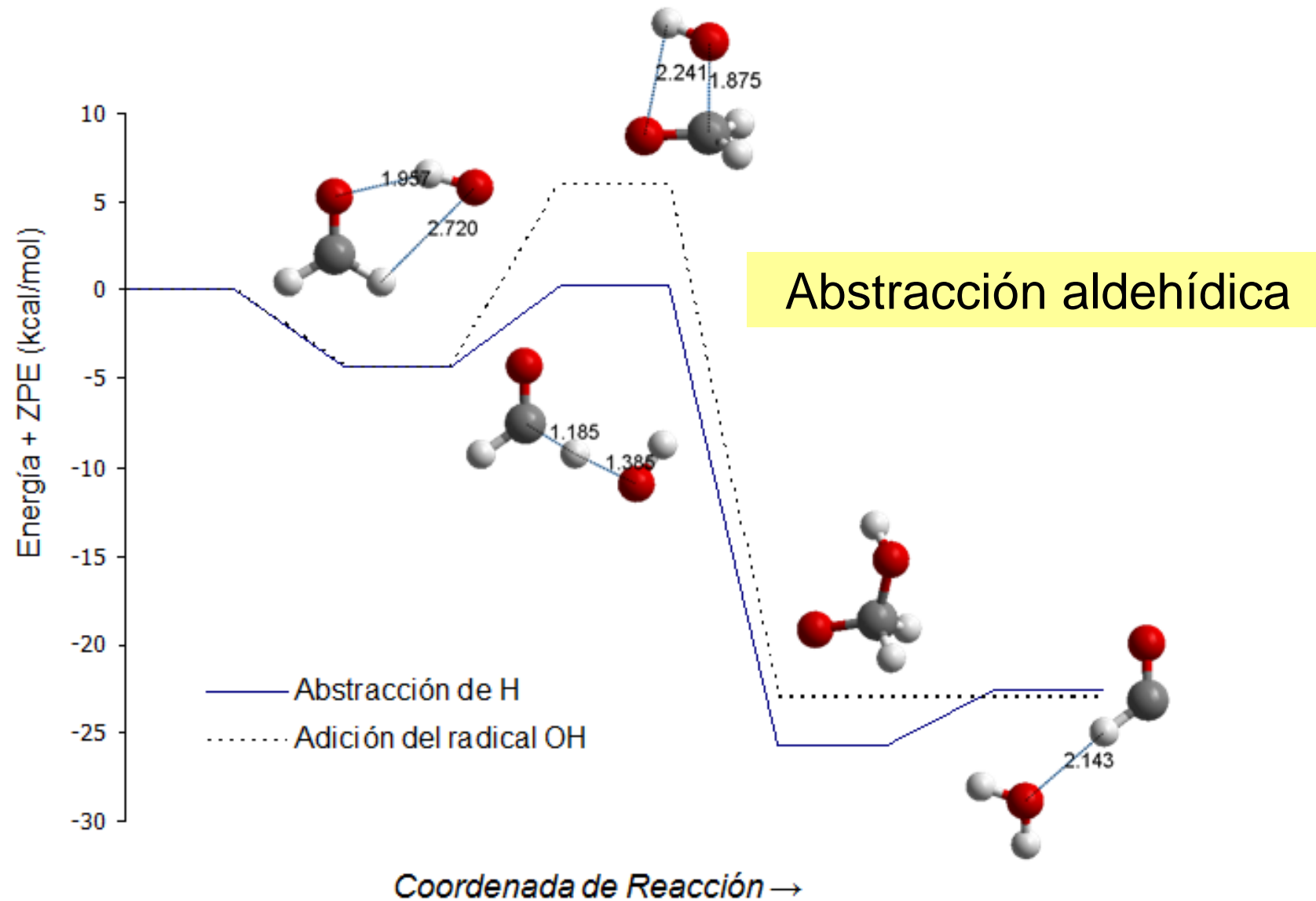
¿Cuál es el primer paso en la oxidación de una molécula por radicales libres?

¿Existe algún camino de reacción predominante ?

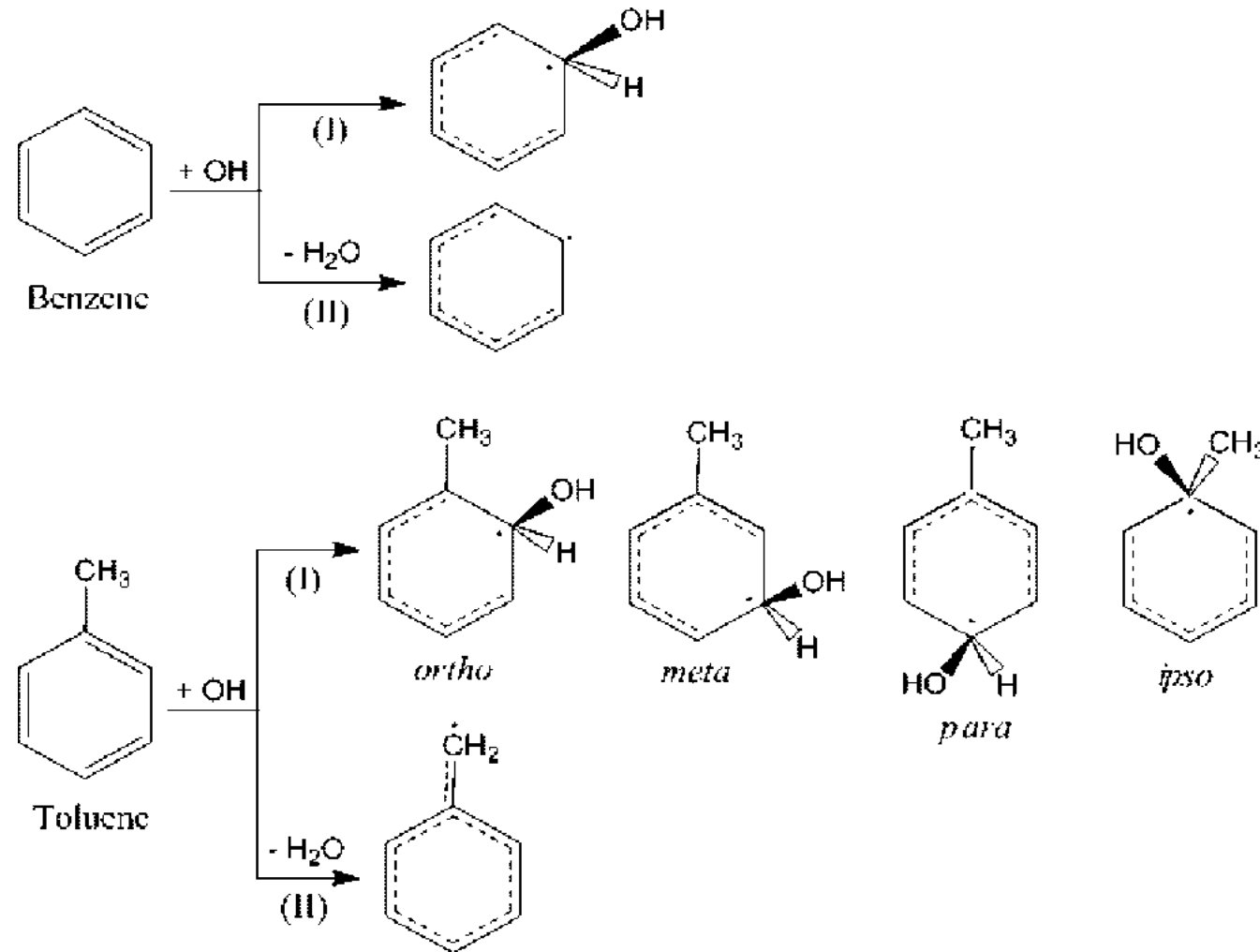
Reacción de Formaldehído con Radicales OH•



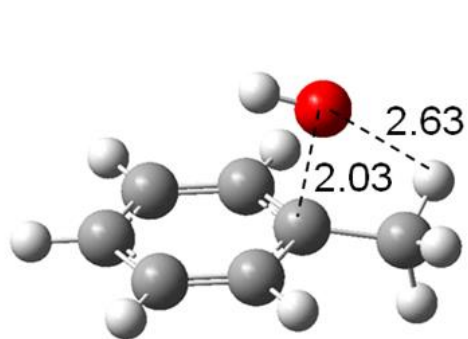
Reacción de Formaldehído + OH• en Fase Gas



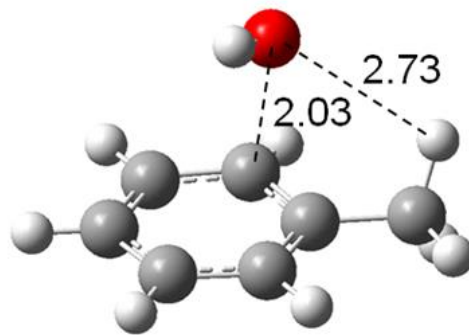
Reacción de Tolueno con Radicales OH en fase gas



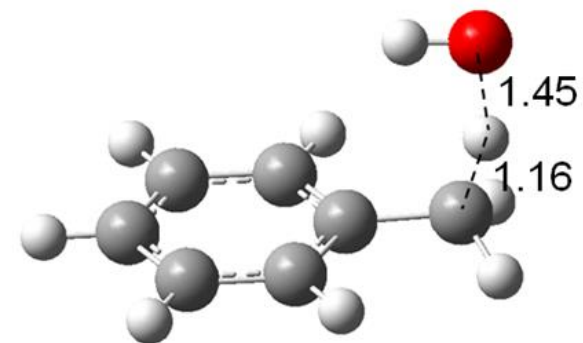
Estructuras de Transición en la Reacción de Tolueno con Radicales OH en Fase Gas



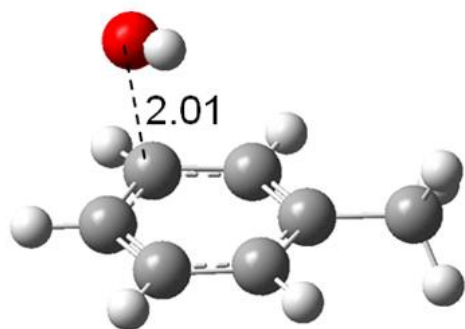
IPSO 4.1 %



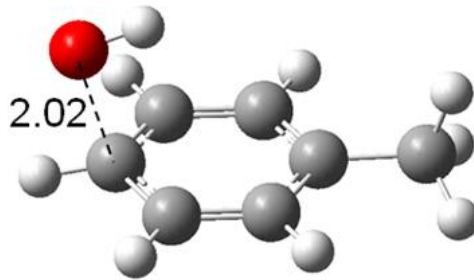
ORTO 69.2 %



**ABSTRACCIÓN
14.0 %**

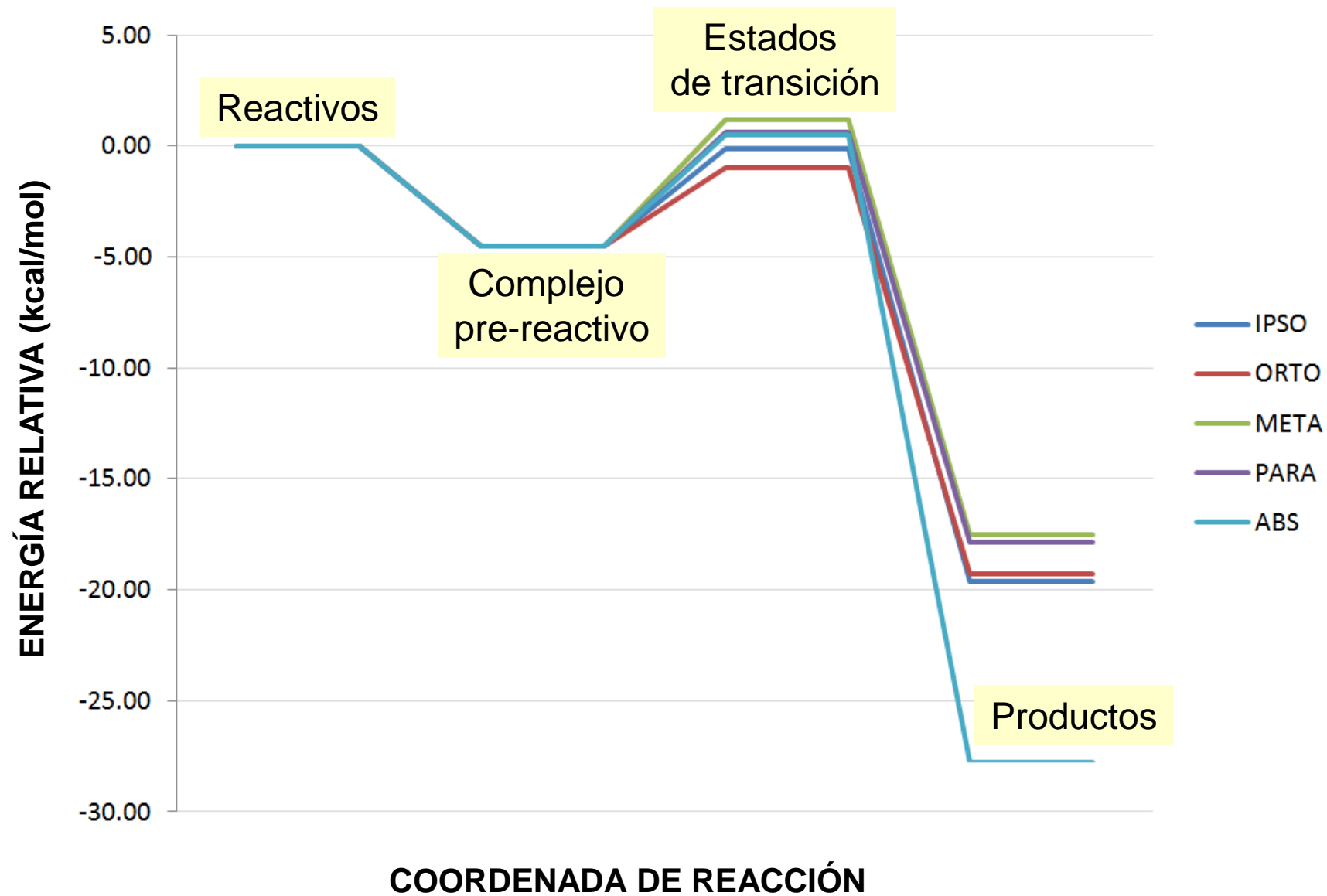


META 2.7 %

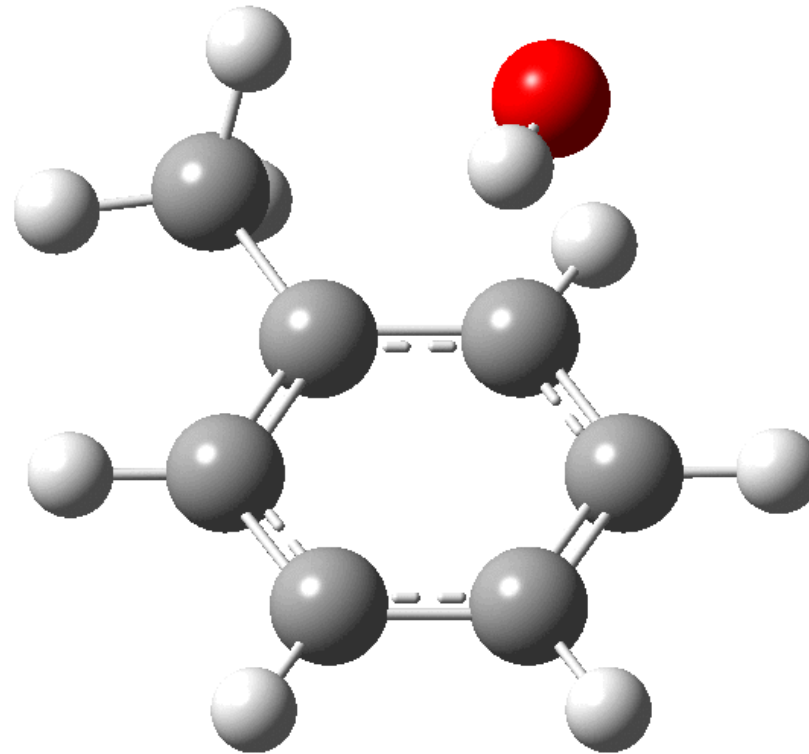


PARA 10.0 %

Reacción de Tolueno con Radicales OH en fase gas

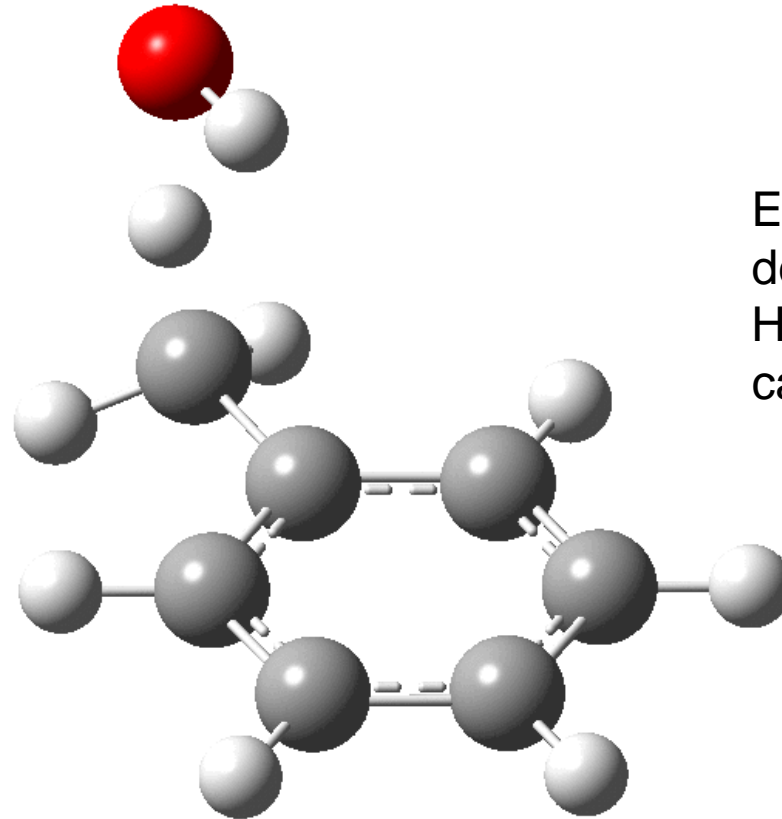


Reacción de Tolueno con Radicales OH en fase gas



Estado de transición
de la adición en la
posición ORTO

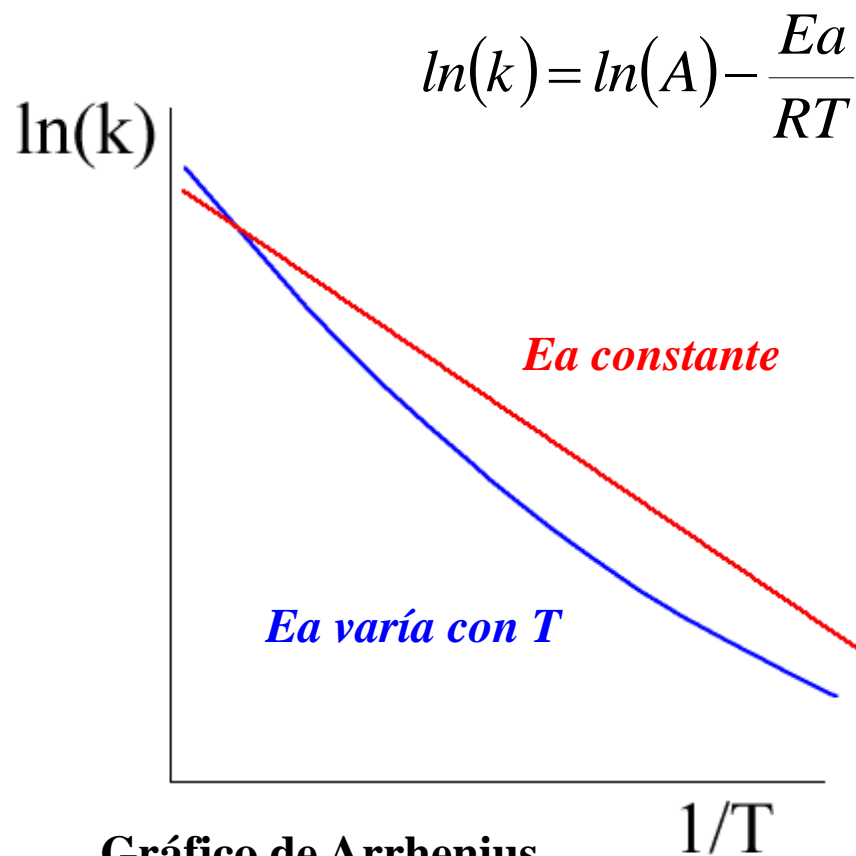
Reacción de Tolueno con Radicales OH en fase gas



Estado de transición
de la abstracción de
Hidrógeno en la
cadena lateral

Reacciones con Energía de Activación Aparente Negativa y Complejos Pre-Reactivos

$$k = Ae^{-Ea/RT}$$



Comportamiento anti-Arrhenius

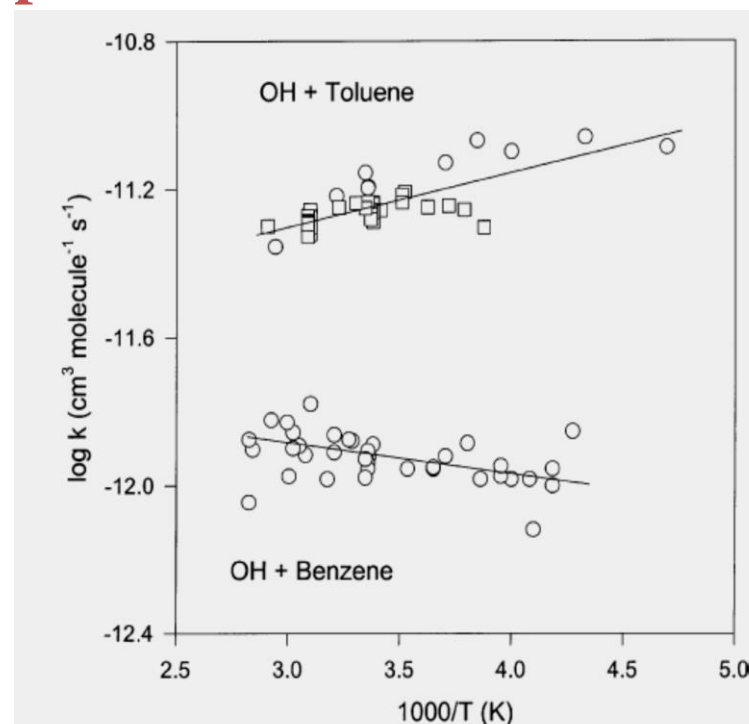
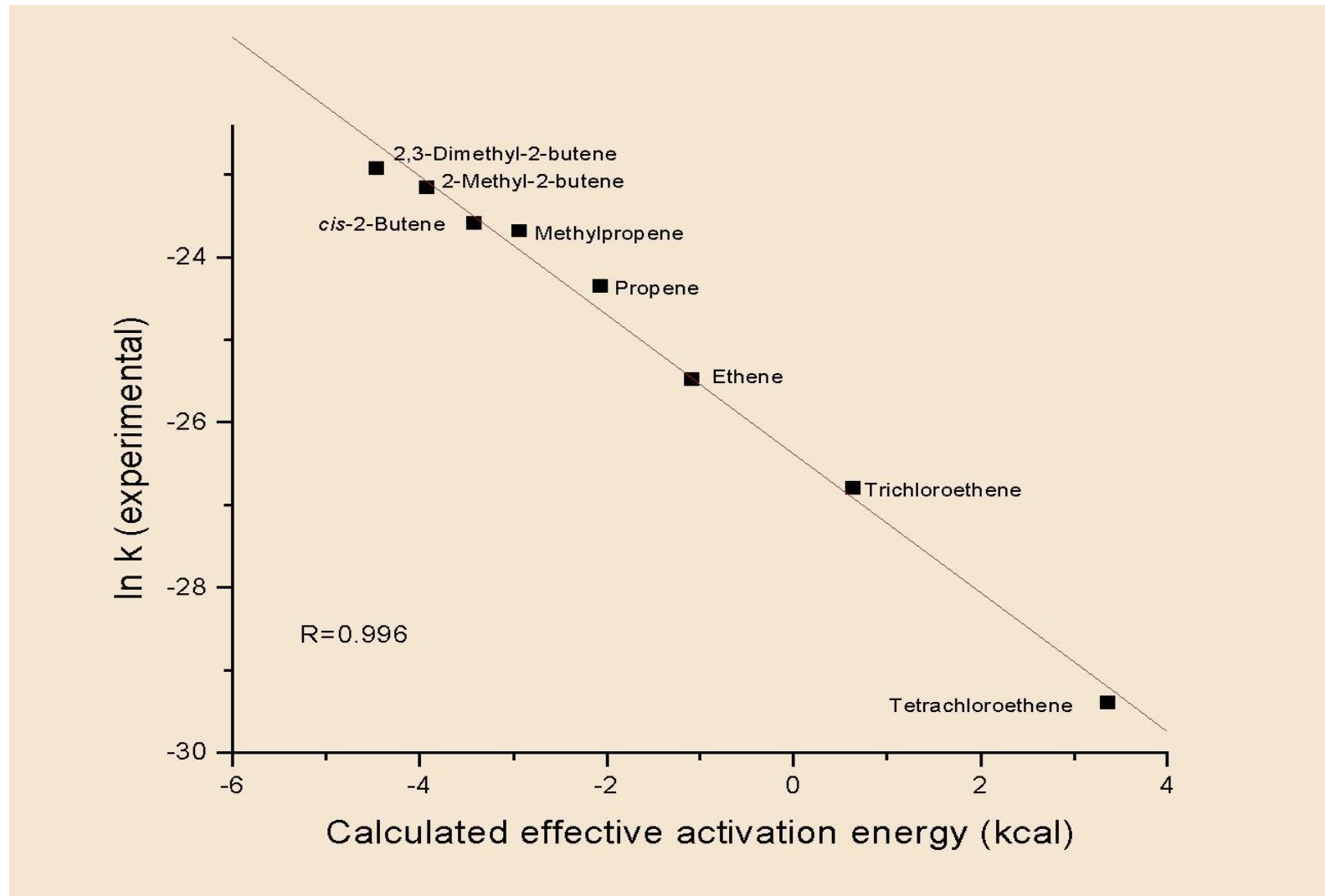


Figure 4. Arrhenius plots of rate constants for the reaction of OH radicals with benzene and toluene (below 400 K). The rate constants plotted are those used in the Calvert et al.⁸ evaluations, and the solid lines are the recommendations of Calvert et al.⁸ (○) absolute rate data; (□) relative rate data.

Correlación entre las Barreras de Reacción calculadas y $\ln(k)$ en la Reacción de Alquenos + OH

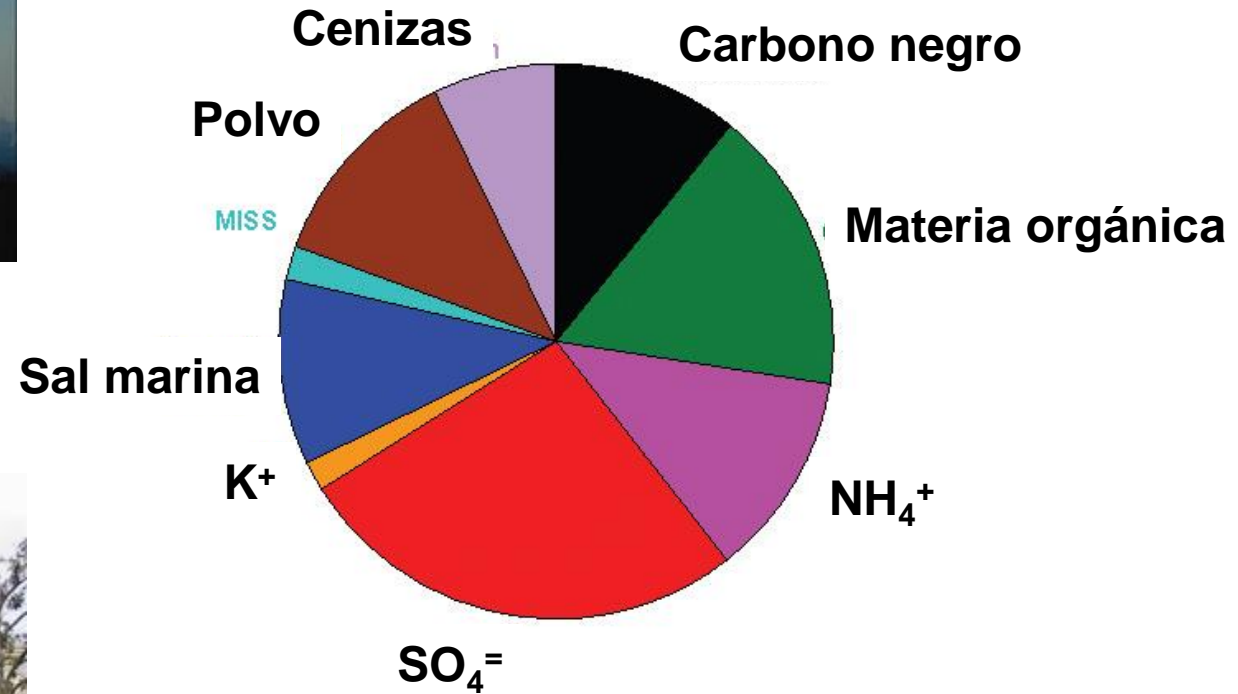


J. R. Alvarez-Idaboy, N. Mora-Diez y A. Vivier-Bunge, *A quantum chemical and classical transition theory explanation of negative activation energies in OH-addition to substituted ethenes*, J. Am. Chem. Soc. **122**, 715 (2000).

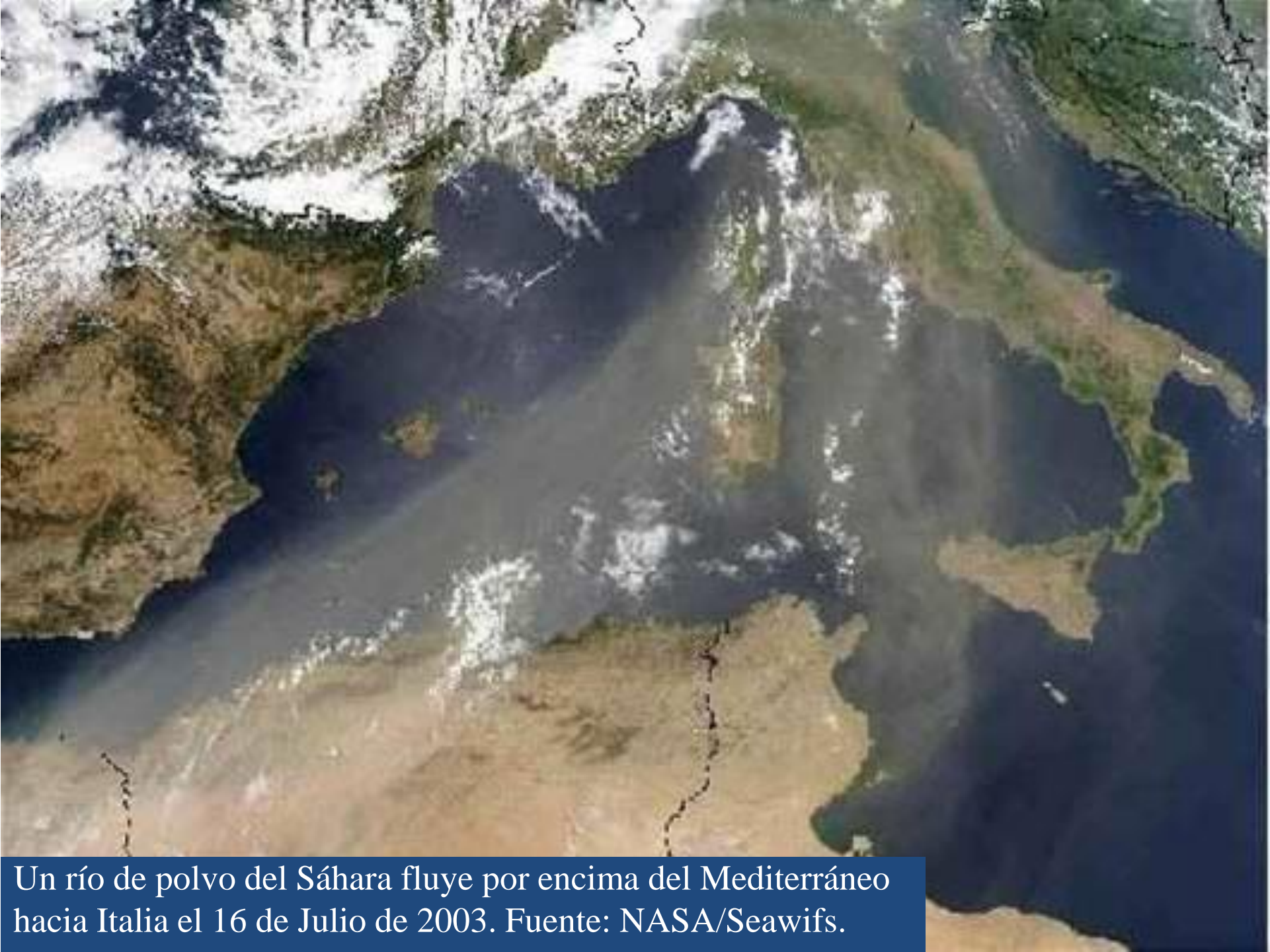
Aerosoles Atmosféricos



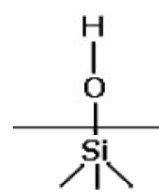
$< 2 \times 10^{-6} \text{ m}$



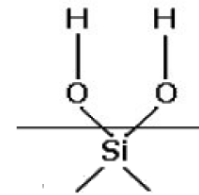
CSIC – Estación Experimental del Zaidín,
Granada, España



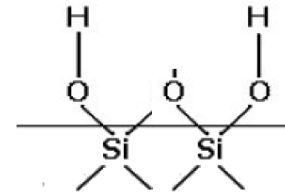
Un río de polvo del Sáhara fluye por encima del Mediterráneo hacia Italia el 16 de Julio de 2003. Fuente: NASA/Seawifs.



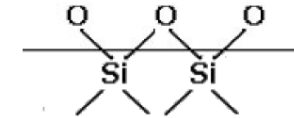
a) grupos silanol
aislados



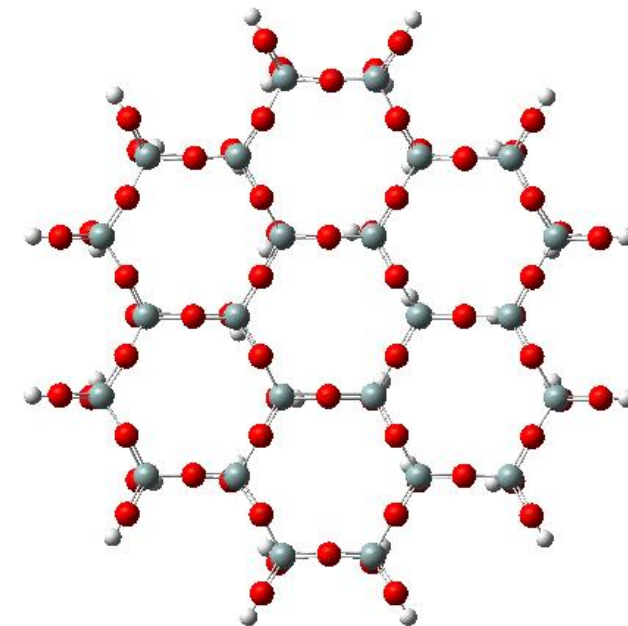
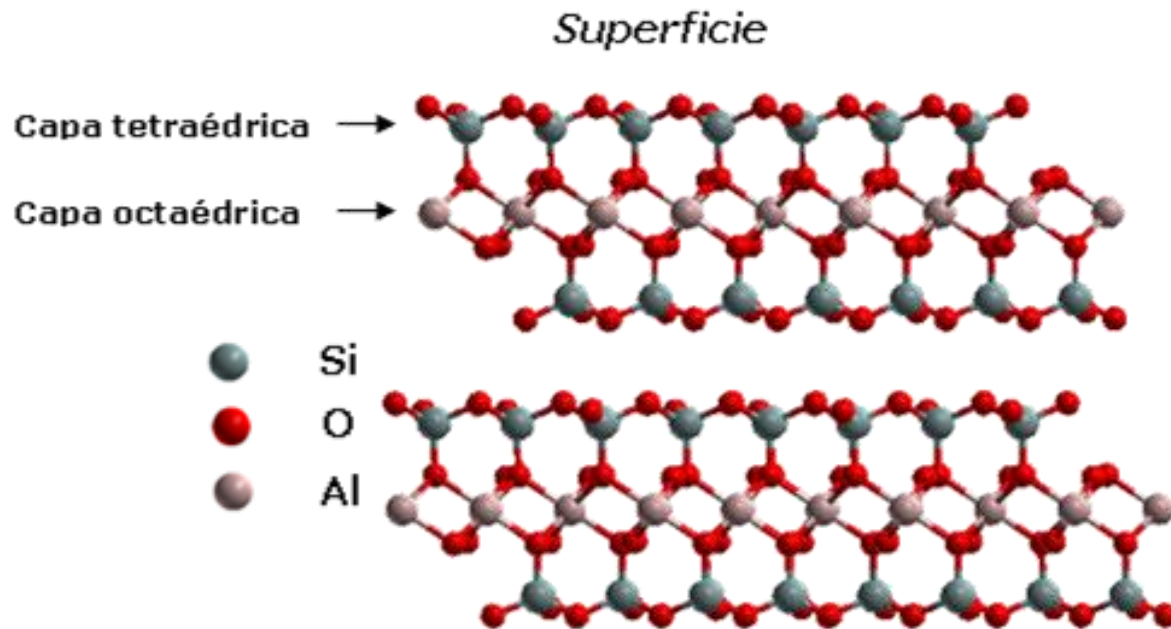
b) grupos silanol
geminales



b) grupos silanol
vecinales



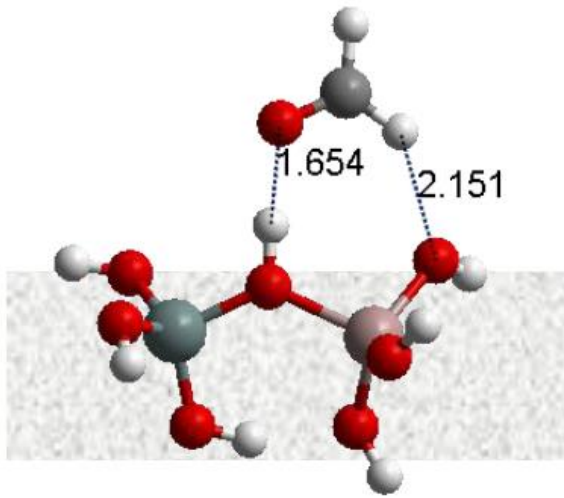
c) puente siloxano



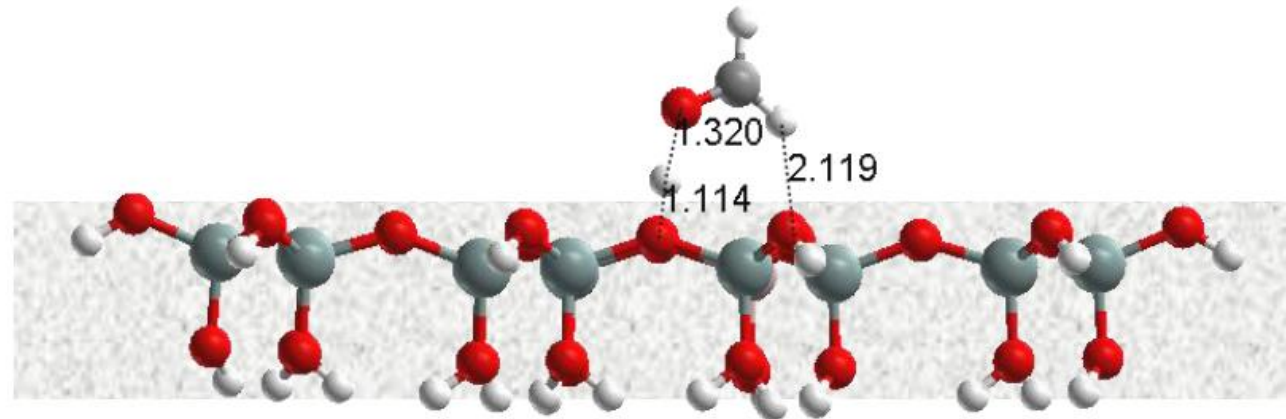
Adsorción de Aldehídos sobre Modelos de Superficie de Silicatos

Energía de adsorción:

$$E_{\text{adsorción}} = E_{\text{superficie+molécula}} - (E_{\text{superficie}} + E_{\text{molécula}})$$

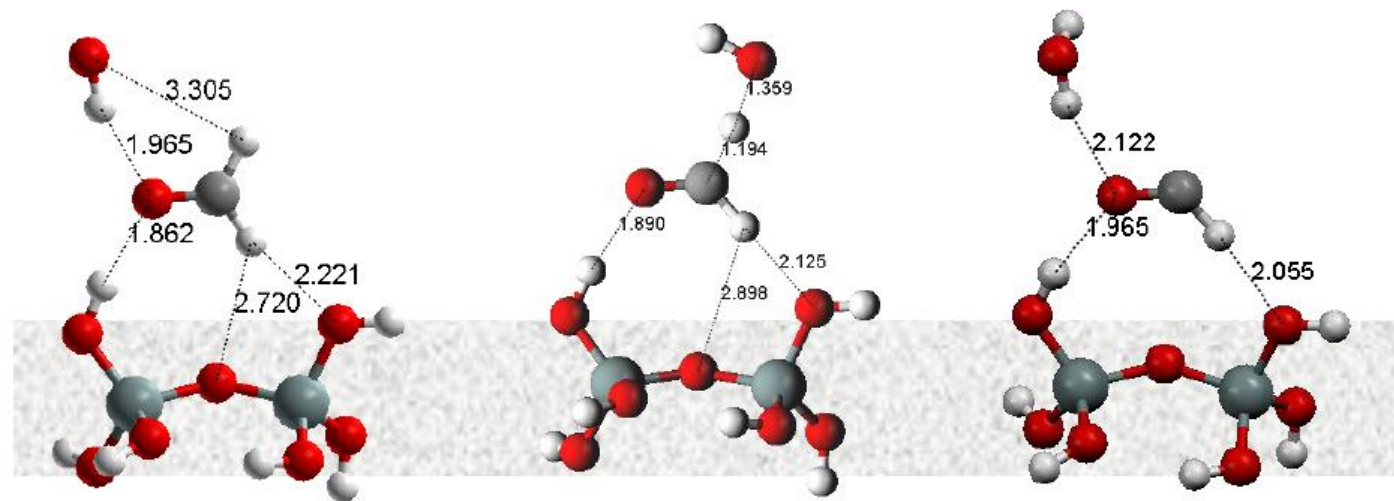


$$E_{\text{ADS}} = -12.40 \text{ kcal/mol}$$



$$E_{\text{ADS}} = -12.10 \text{ kcal/mol}$$

Reacción de Formaldehído sobre Modelos de Superficie

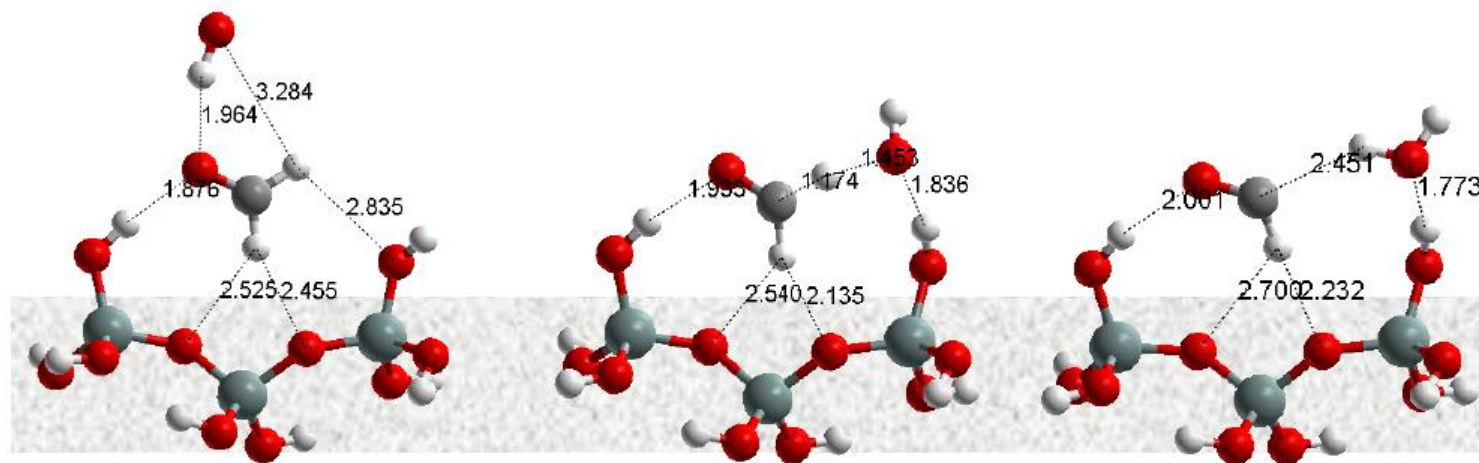


RC

TS

PC

a) Reacción en la superficie del dímero.



RC

TS

PC

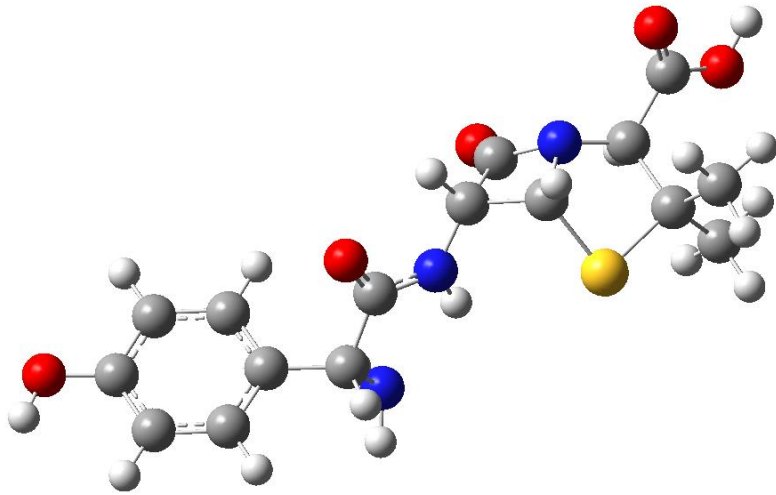
b) Reacción en la superficie del trímero lineal.

Constantes de velocidad (en $\text{cm}^3/\text{molecule s}$) a 298 K para las reacciones de abstracción de H en fase gas y con el monómero $\text{Si}(\text{OH})_4$.

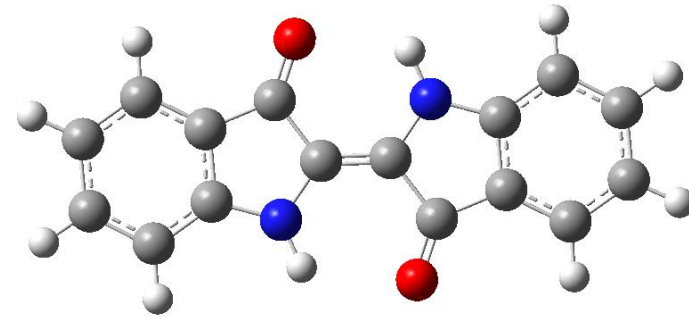
	σ	K_{eq}	κ	k_2	k^{ef}
<i>BHandHLYP/6-311g**</i>					
Abstracción fase gas	2	9.68×10^{-22}	2.71	1.14×10^{10}	1.10×10^{-11}
Abstracción M1	1	8.25×10^{-22}	5.00	1.95×10^9	1.61×10^{-12}
<i>CBS-QB3</i>					
Abstracción fase gas	2	2.23×10^{-22}	1.12	6.43×10^{10}	1.43×10^{-11}
Abstracción M1	1	5.73×10^{-23}	1.06	8.29×10^{10}	4.74×10^{-12}

$$k^{exp} = 1.0 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molecule s}$$

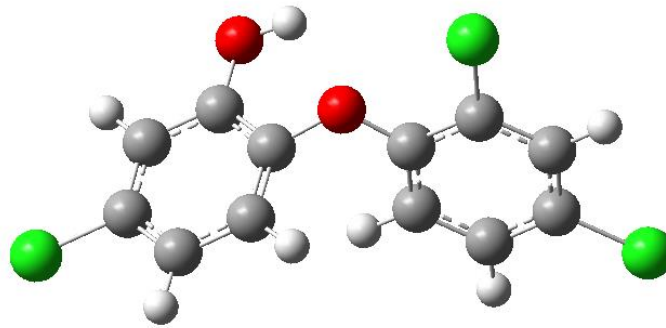
Degradación de contaminantes por radicales libres en el agua



FARMACOS
Ej.: amoxicilina



COLORANTES
Ej.: indigo



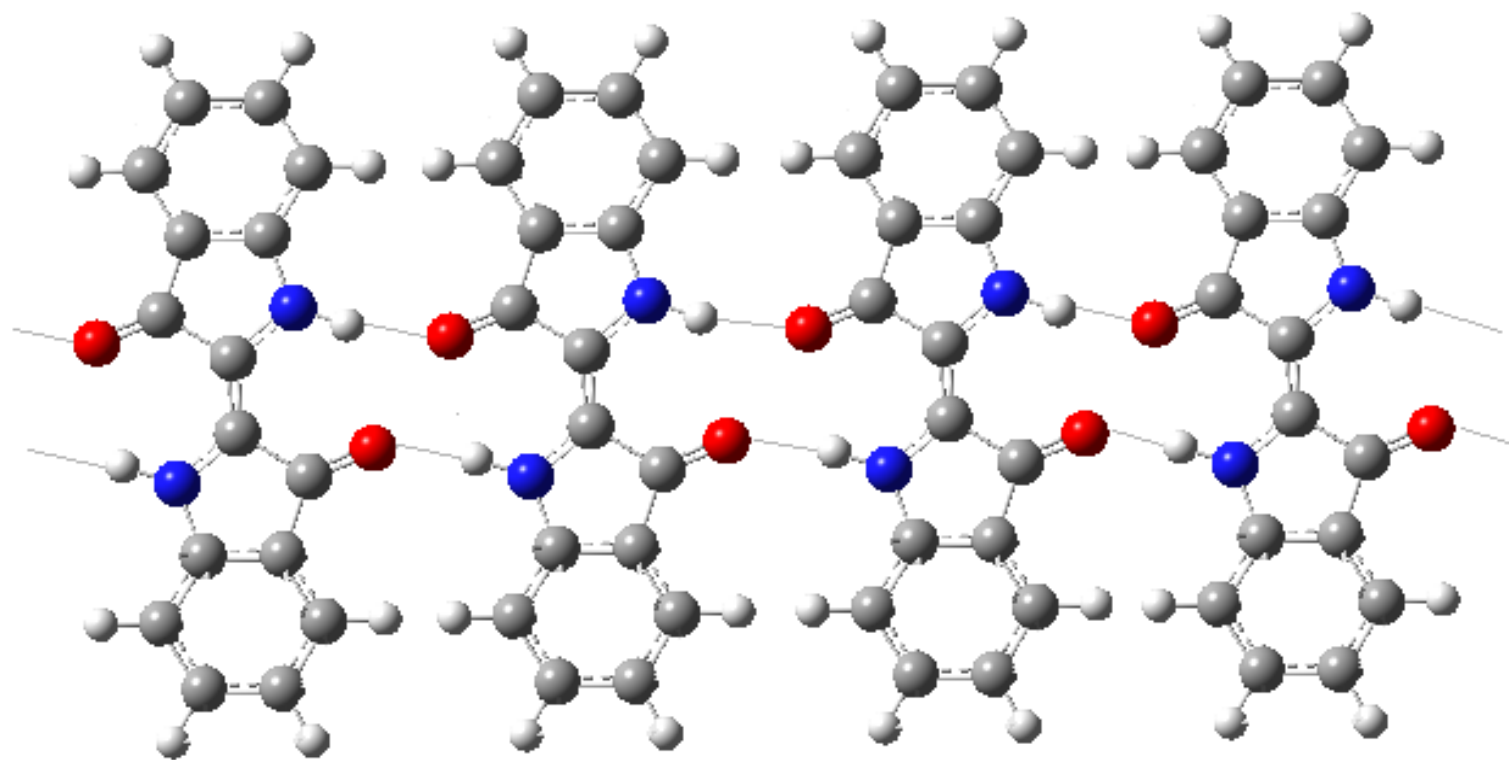
PESTICIDAS
Ej.: triclosan

Degradación de Indigo por radicales libres en el agua

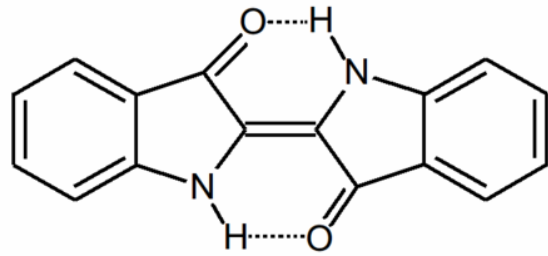
Uno de los pigmentos mas utilizados en la historia de la humanidad es el índigo, que ha sido empleado por miles de años en varios continentes, y que actualmente es el colorante azul de la mezclilla. La molécula del índigo es muy estable y el sólido es insoluble en agua.



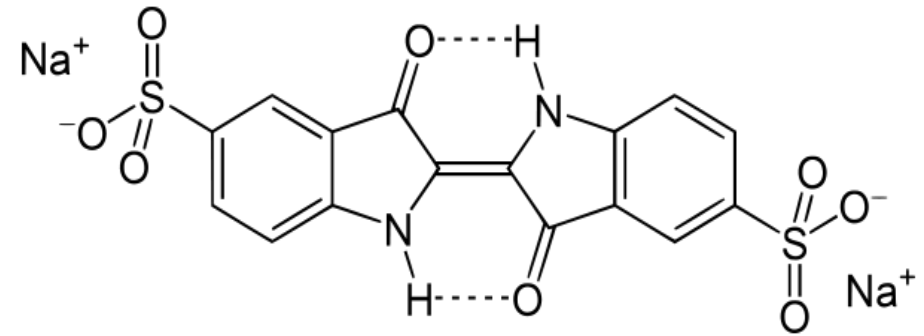
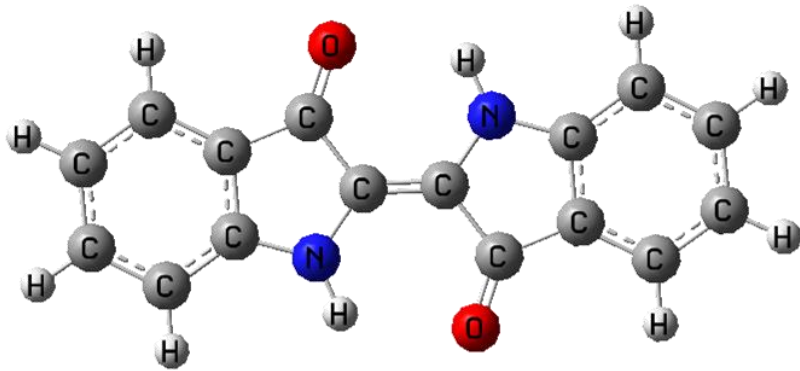
Lavado de la mezclilla en Tlaxcala



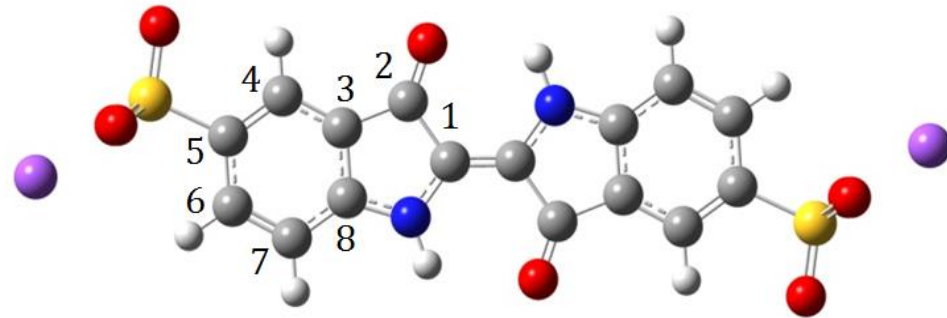
Puentes de hidrógeno intramoleculares en el índigo.



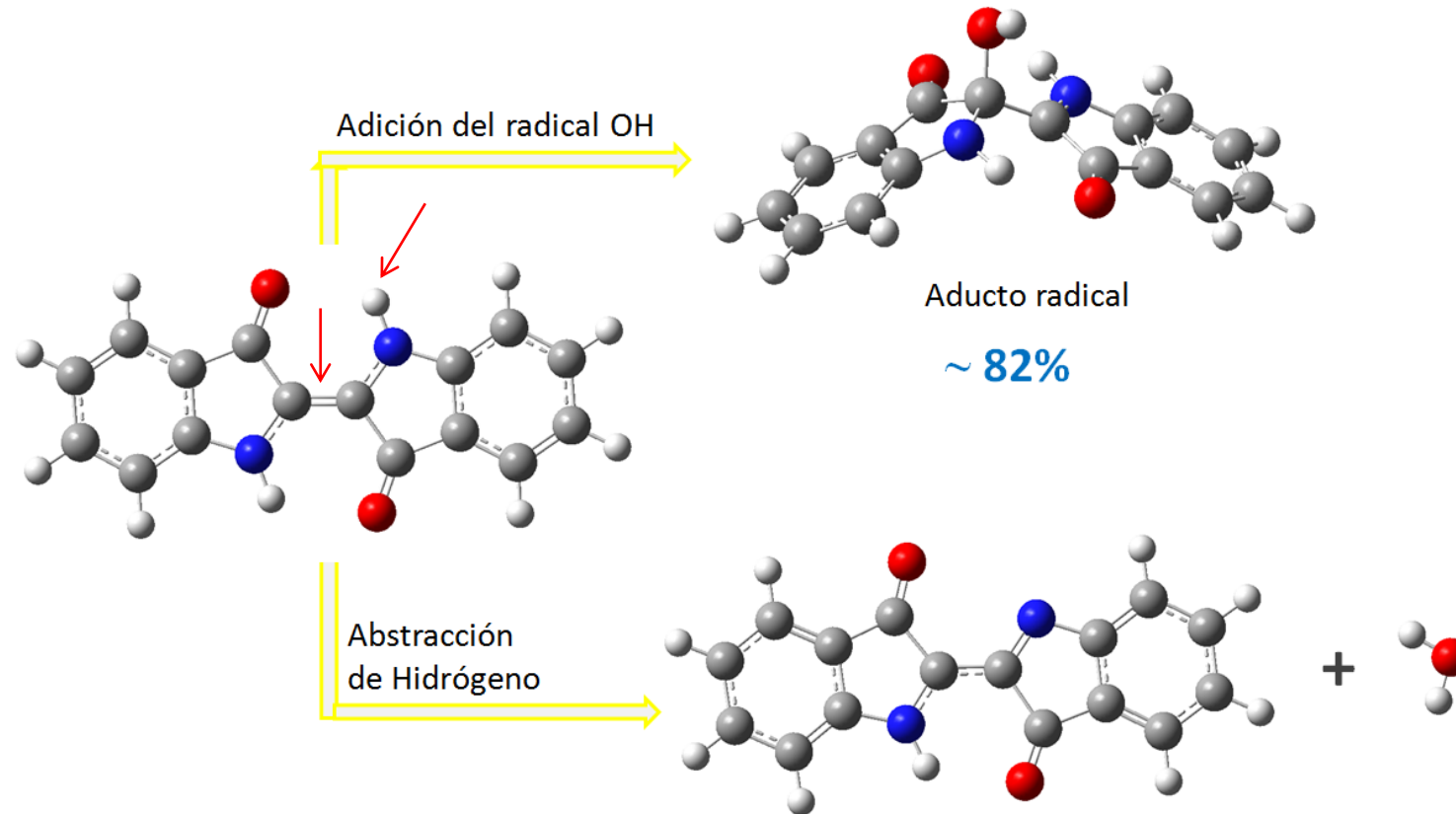
Estructura química de la molécula de índigo.



Estructura química de la molécula de índigo carmín (sustituido con sulfonatos).

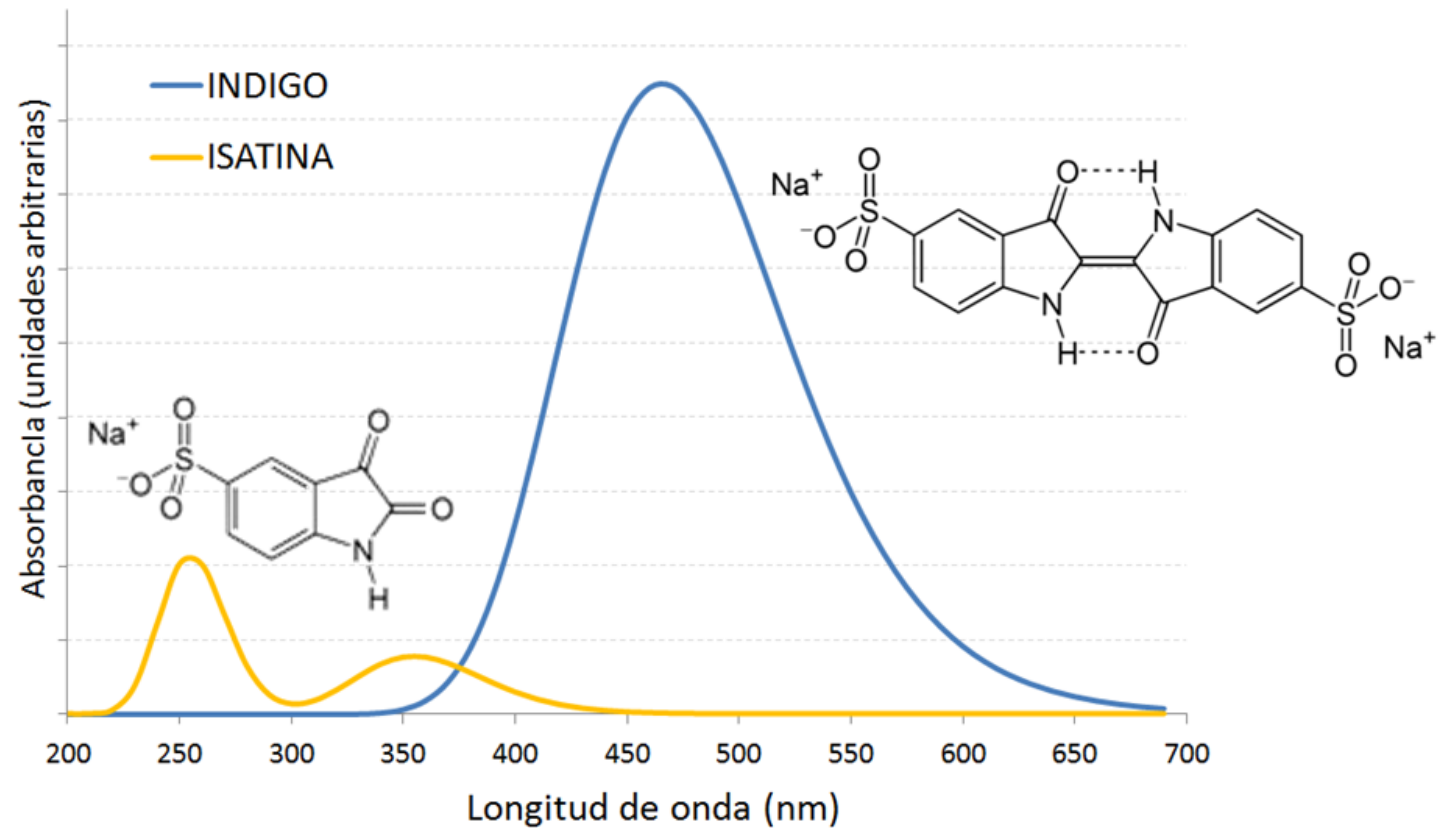


Oxidación del indigo



La constante de velocidad total calculada ($5.71 \times 10^9 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$) está en el límite de difusión en medio acuoso, lo que implica una degradación rápida del colorante en presencia de radicales $\cdot\text{OH}$.

Espectro de absorción UV-Visible del indigo carmín y su principal producto de oxidación, la isatina.

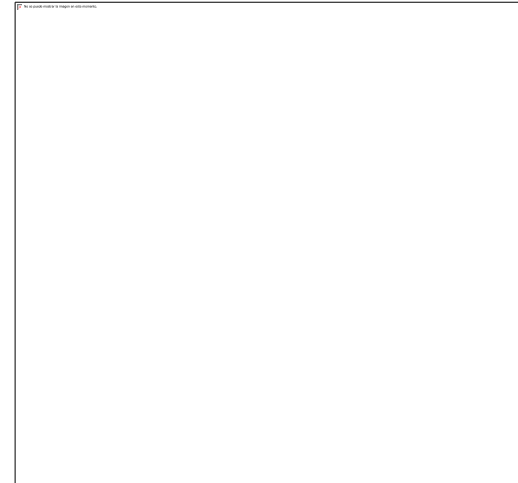


Debido a que las bandas de absorción en los espectros UV/Visible del colorante y del producto de oxidación (isatina) aparecen en regiones diferentes del espectro, la evolución de la reacción puede ser monitoreada empleando esta técnica.

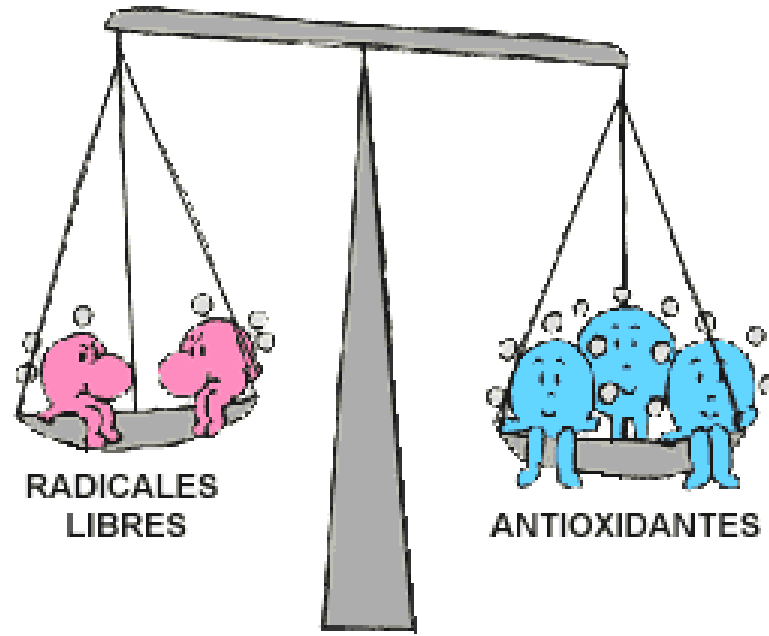
Química Computacional Aplicada al Estudio de Antioxidantes y Estrés Oxidativo

¿Qué se puede estudiar con la Química Computacional?

- Daño a moléculas de interés biológico (proteínas, ADN,...)
- Actividad antioxidante
 - primaria (trampas de radicales libres)
 - secundaria (trampas de iones metálicos)
- Reparación de daños
- Regeneración de antioxidantes



ESTRÉS OXIDATIVO



ENFERMEDAD ← → **SALUD**

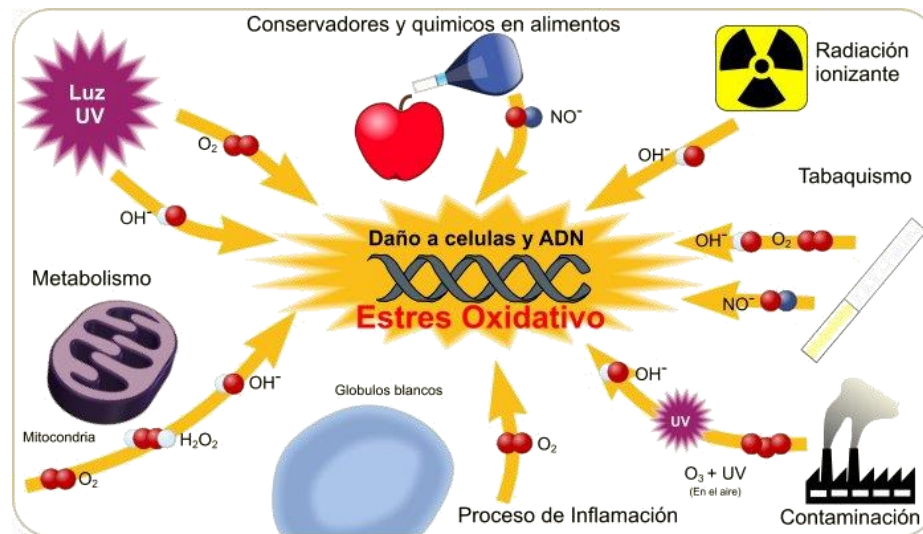
En los seres vivos existe un equilibrio interno entre la producción de radicales libres y la acción de los antioxidantes.

Salud y enfermedad



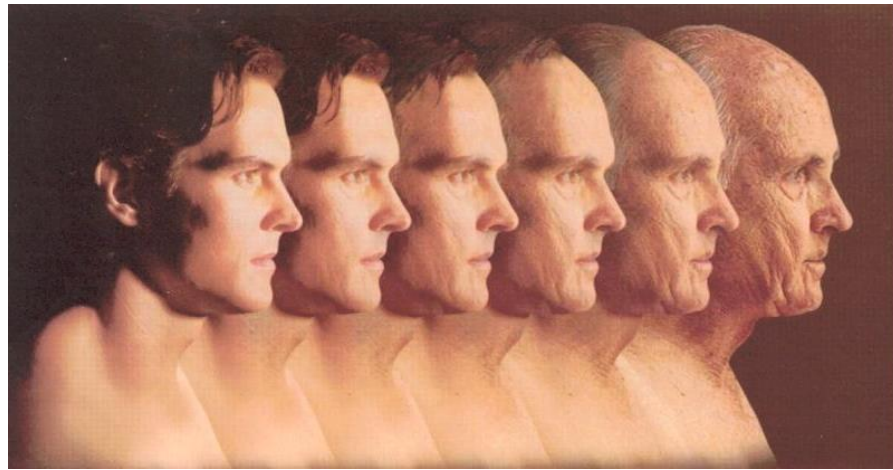
Efectos de los Radicales Libres en las moléculas biológicas

- Peroxidación Lipídica
- Oxidación de proteínas
- Oxidación de Carbohidratos
- Mutaciones del ADN



El envejecimiento es consecuencia del Estrés Oxidativo

Una de las teorías del envejecimiento, es la del desequilibrio
entre radicales libres y antioxidantes



1956 Denham- Free Radical Theory of Ageing

***Estrategias
para combatir
el estrés oxidativo:***

- Prevenir

- Atrapar

- Reparar

-Evitar exposición a las fuentes
-**Antioxidantes** capaces de disminuir
o prevenir la formación de radicales
libres

-**Antioxidantes** capaces de
atrapar/desactivar radicales libres
antes de que reaccionen con los
blancos biológicos

-**Antioxidantes** capaces de reparar
los sitios dañados en los blancos
biológicos

¿Cuáles son las fuentes externas de radicales libres?

- Radiación ionizante
- Luz ultravioleta
- Contaminación ambiental
- Conservantes químicos, pesticidas
- Tabaquismo

Fuentes internas de radicales libres:

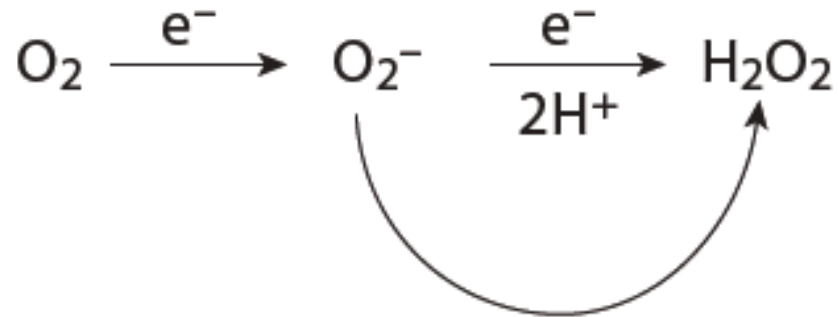
- Procesos enzimáticos
- Reacción de Fenton:



Oxygen: How Do We Stand It?

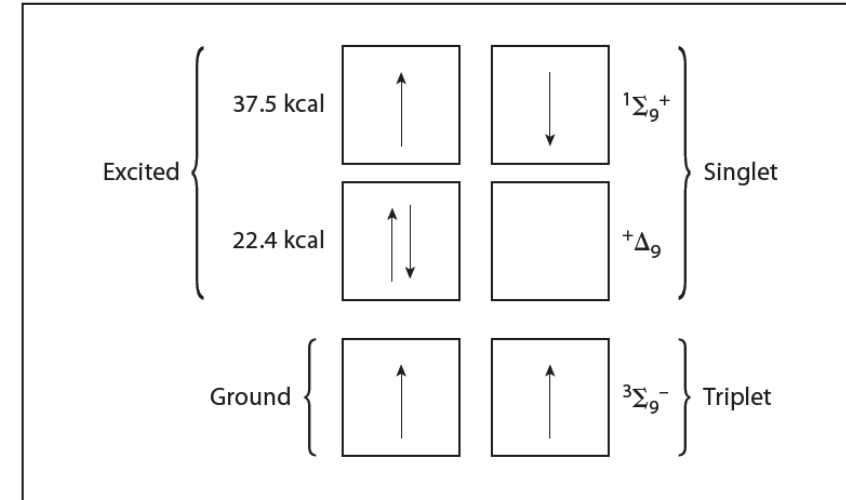
Irwin Fridovich

Department of Biochemistry, Duke University Medical Center, Durham, N.C., USA



Superoxide dismutase

Reducción secuencial de un electrón.



Configuraciones electrónicas de O₂.

Vida media de los principales especies oxidantes en sistemas biológicos

Especie	Denominación	Vida media a 37°C (s)
Superóxido	$\cdot\text{O}_2^-$	1×10^{-6}
Hidroxilo	$\cdot\text{OH}$	1×10^{-9}
Alcoxilo	$\cdot\text{OR}$	1×10^{-6}
Peroxilo	$\cdot\text{OOR}$	1×10^{-2}
Oxígeno singlete	$^1\text{O}_2$	1×10^{-6}
Óxido nítrico	NO	1
Oxígeno molecular	O_2	$> 10^2$

El radical OH es la especie más reactiva en sistemas biológicos

Antioxidantes

Sustancias que, aun a bajas concentraciones, disminuyen o previenen la oxidación del sustrato (ADN, lípidos, proteínas).

¿Cómo unos pocos pueden proteger a muchos?



**Reaccionando
más rápido !!!**



Cinética

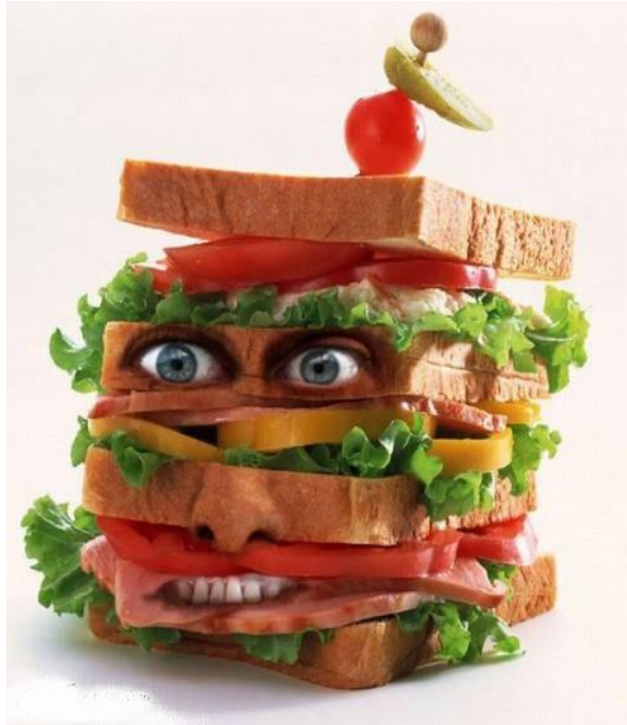
Antioxidante ideal

- **Versátil**, capaz de reaccionar eficientemente con una amplia gama de radicales libres.
- **Cruzar las barreras biológicas** y transportarse rápidamente a las células.
- **Disponible**. Es necesario que sea consumido en la dieta, como suplementario alimentario, o producido endógenamente.
- **Regenerable** (pueda ser regenerado por otro antioxidante, reaccione con 2 radicales libres, o que sus metabolitos también tengan actividad antioxidante).
- **No tóxico** ni antes ni después de reaccionar con los radicales libres.
- **Terminar la cadena** de reacción radicalica o formar productos de reacción mucho **menos reactivos** que los radicales iniciales.
- **Reaccionar rápidamente**.

*Obtenemos la mayor parte de los
antioxidantes de nuestra dieta*

Exógenos

Natural



¡Somos lo que comemos!

Resveratrol... la fuente de la eterna juventud?

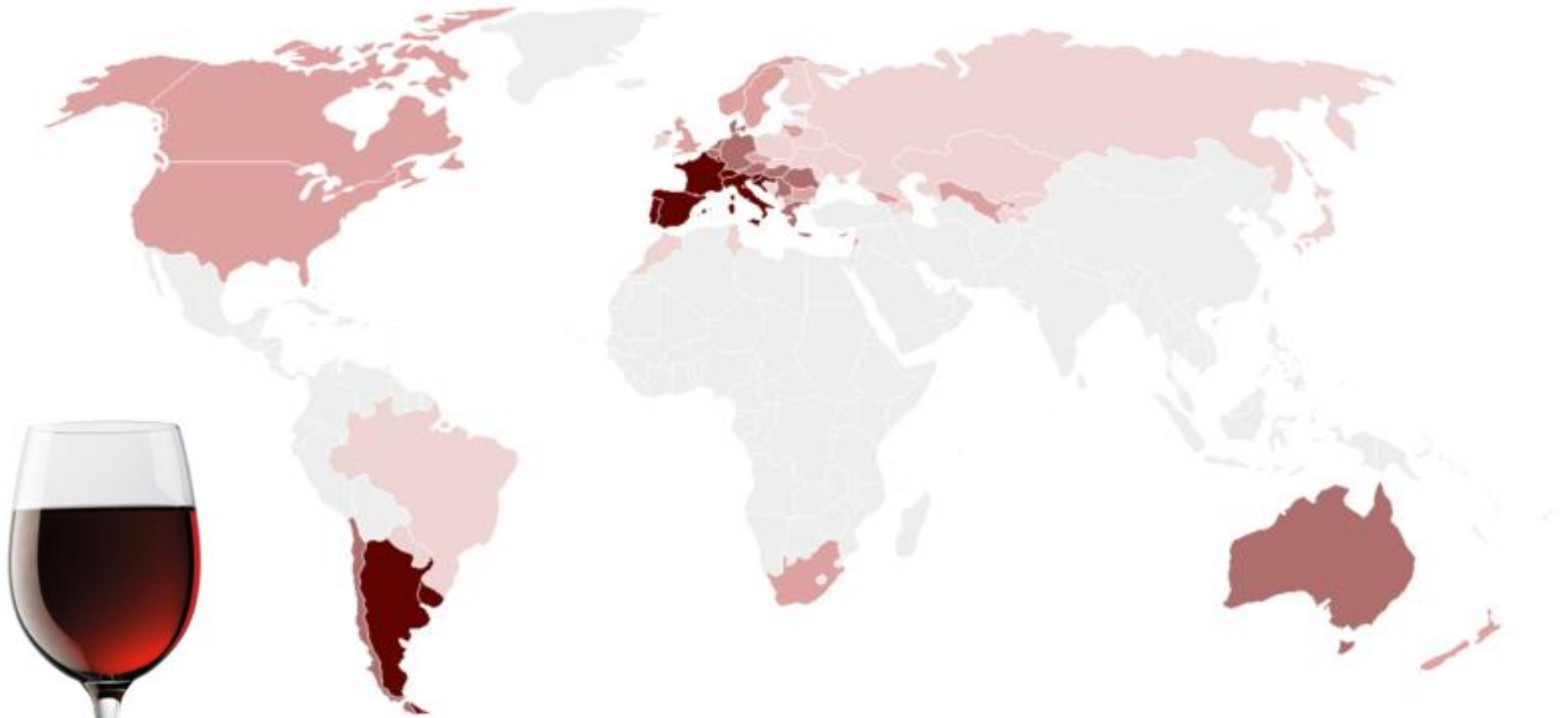
El resveratrol activa el gen SIRT1, que regula la duración de la vida.

Sinclair, en el 2003, encuentra que el consumo de resveratrol aumenta la longevidad en ratones un 31%, y hasta el 59% en moscas y peces.

Experimentos de Longevidad

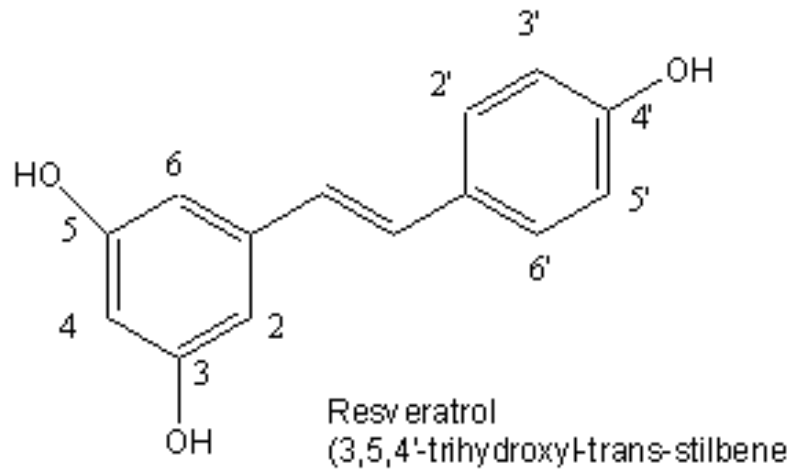
Yeast Cells	Fruit Flies	Roundworm	Killfish	Rodents
				
Increased Lifespan 60%	Increased Lifespan 29%	Increased Lifespan 15%	Increased Lifespan 27-59%	Increased Lifespan 31%

La “Paradoja Francesa”

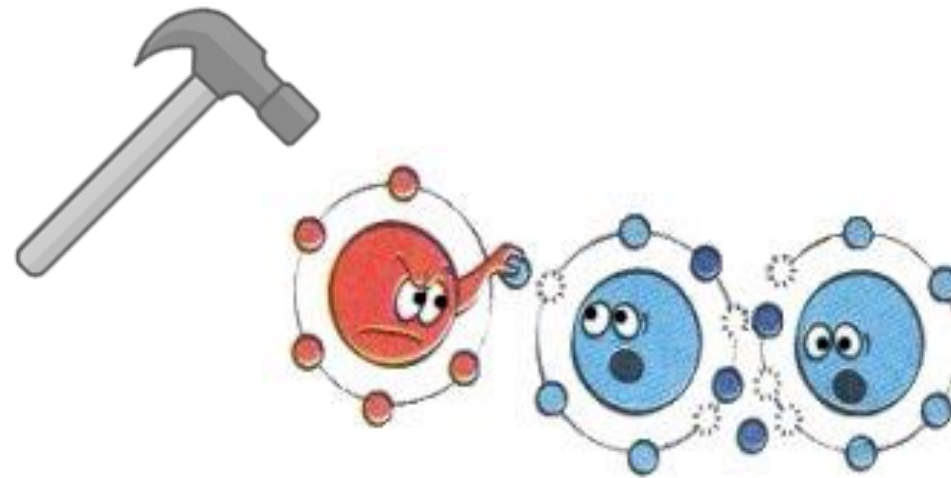


Consumo de vino tinto por regiones
en el mundo.

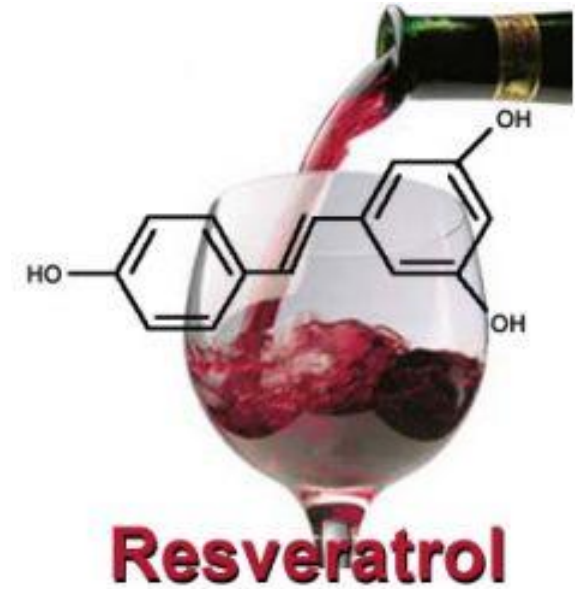
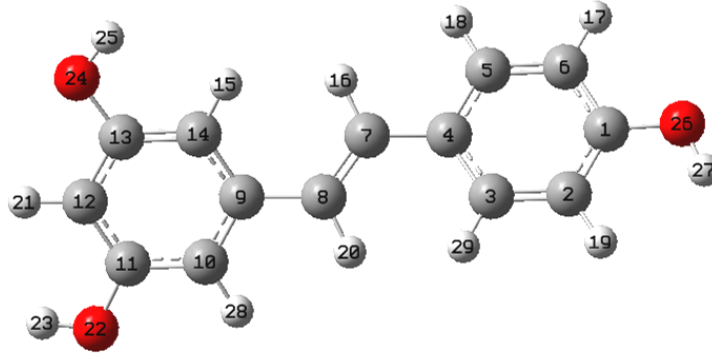
Actividad Antioxidante del *trans*-Resveratrol



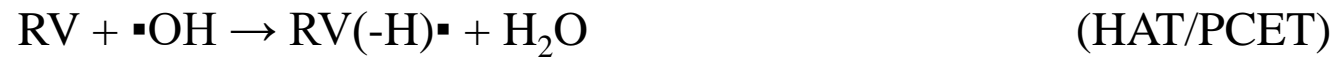
- Antioxidante
- Anti-inflamatorio
- Anti-aterogénico
- Inhibidor de agregación de plaquetas
- Promotor de vasodilatación



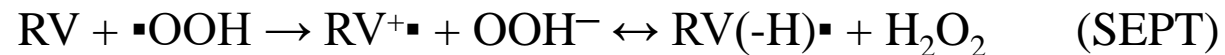
La Química Cuántica del vino tinto



Resveratrol + $\bullet\text{OH}$

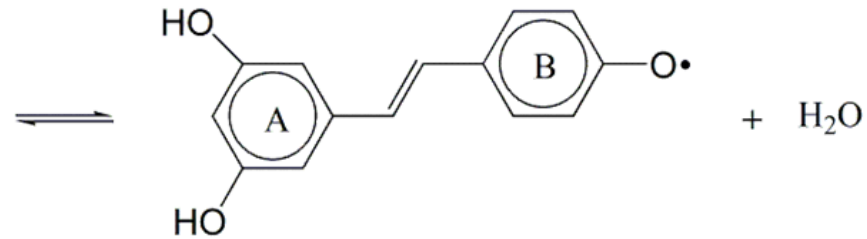
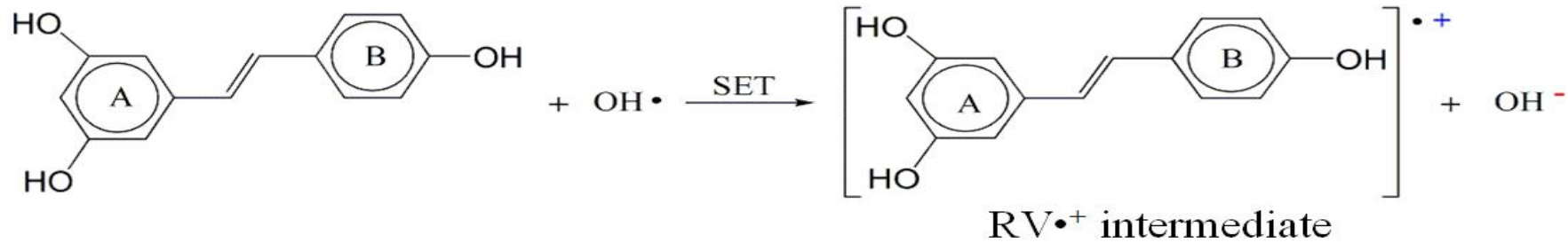


Resveratrol + $\bullet\text{OOH}$



La Química Cuántica del vino tinto

Transferencia de un solo electrón (SET):



$$\Delta G = -6.45 \text{ kcal/mol}$$

4B SEPT product

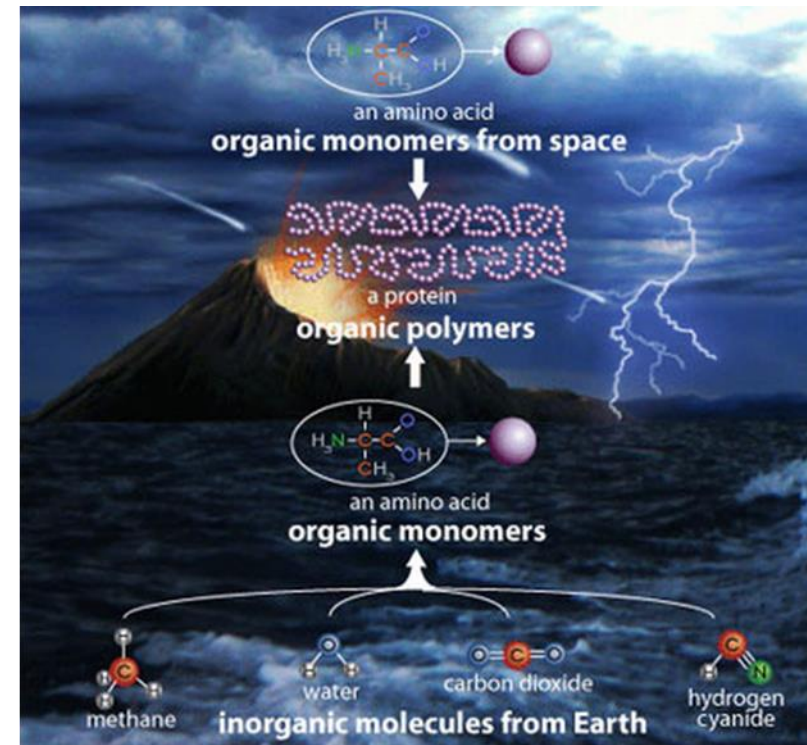
ΔG^\ddagger	ΔG	k_D	k^{SET}	k_{app}^{SET}
0.33	-6.41	7.95×10^9	8.71×10^{13}	7.95×10^9

REVIEW ARTICLE

Melatonin: an ancient molecule that makes oxygen metabolically tolerable

Lucien C. Manchester¹,
Ana Coto-Montes^{1,*}, Jose Antonio
Boga^{1,†}, Lars Peter H. Andersen^{1,‡},
Zhou Zhou^{1,§}, Annia Galano²,
Jerry Vriend³, Dun-Xian Tan¹ and
Russel J. Reiter^{1,*}

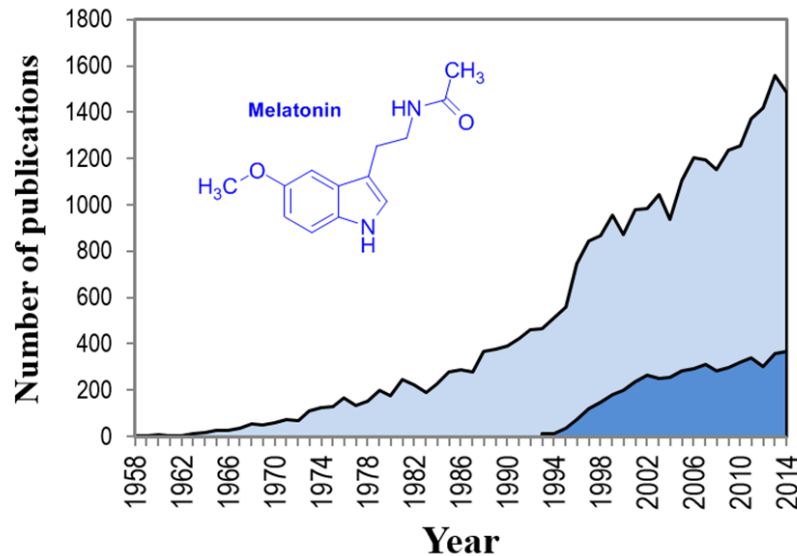
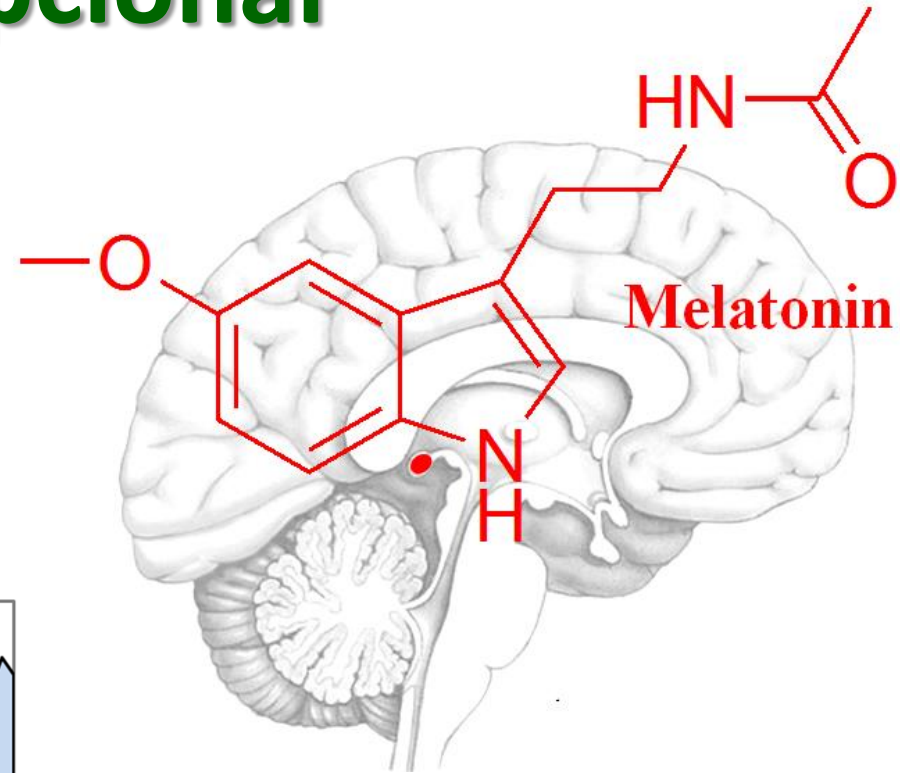
- Hace 3500 millones de años –
Atmósfera anaeróbica.
- Hace 2500 millones de años –
Catástrofe del Oxígeno (GOE),
extinción masiva de organismos
anaeróbicos.
- Sobrevivieron las cianobacterias,
porque producían melatonina.



Atmósfera prebiótica de la Tierra

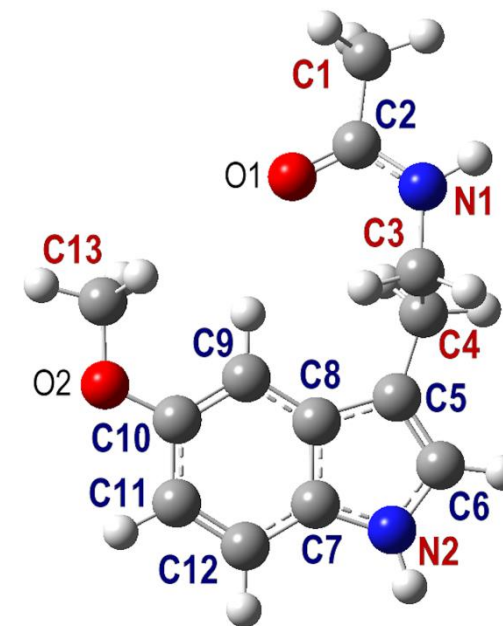
Melatonina: un antioxidante excepcional

- Antioxidante
- Immuno protector
- Anti-inflamatorio
- Inhibidor de procesos cancerígenos
- Inhibidor de la esclerosis múltiple
- Regulador del ritmo circadiano



Rate constants ($M^{-1}s^{-1}$)

	aqueous solution		benzene solution	
	R1= \bullet OH	R2= \bullet OOH	R1= \bullet OH	R2= \bullet OOH
<i>SET</i>	8.16×10^9			
<i>HAT</i>				
C1	9.37×10^6		1.48×10^9	
C1b	1.87×10^4		6.63×10^7	
C3	3.84×10^7		1.92×10^9	
C4	1.11×10^9	1.24×10^{-2}	2.27×10^9	1.15×10^1
C13	1.40×10^9		2.28×10^9	
N1	1.41×10^2		6.44×10^6	
N2	7.39×10^8		2.25×10^9	
<i>RAF</i>				
C5	1.17×10^9		1.75×10^9	
C6	1.19×10^9	1.99×10^1	1.75×10^9	3.00×10^2
C7	2.11×10^8		1.59×10^9	
C9	1.18×10^9		1.75×10^9	
C10	1.16×10^9		1.73×10^9	
C11	1.16×10^9		1.73×10^9	
C12	9.73×10^8		1.73×10^9	
Overall	1.85×10^{10}	1.99×10^1	2.23×10^{10}	3.11×10^2
Exp.	1.25×10^{10}			
	2.7×10^{10}			



The rate constant corresponding to the \bullet OOH damage to polyunsaturated fatty acids is $1.18-3.05 \times 10^3 M^{-1}s^{-1}$

De Grey ADNJ (2002) J DNA Cell Biol 21:251.

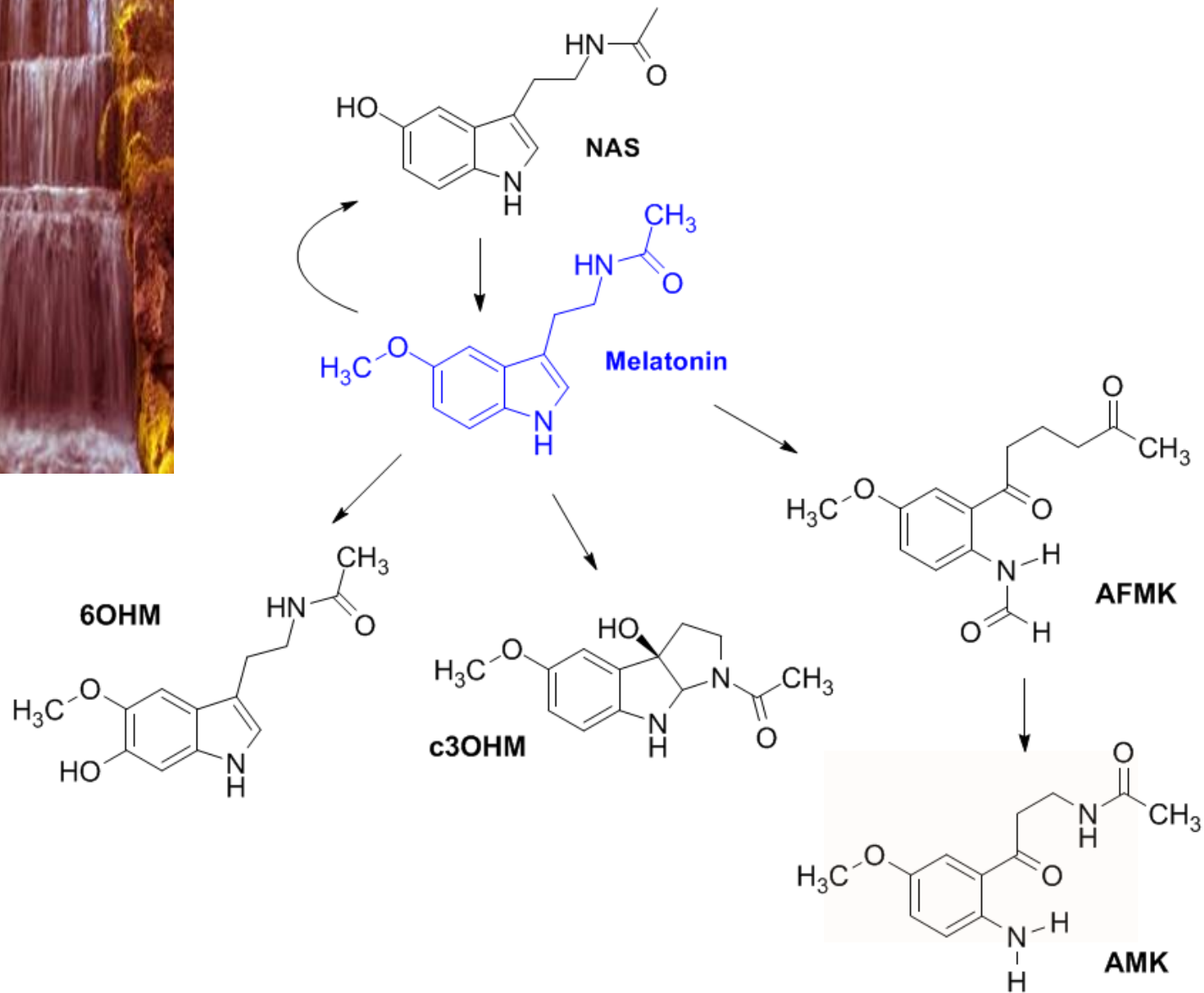
Melatonin is not efficient as a ROO \bullet scavenger



Free radicals



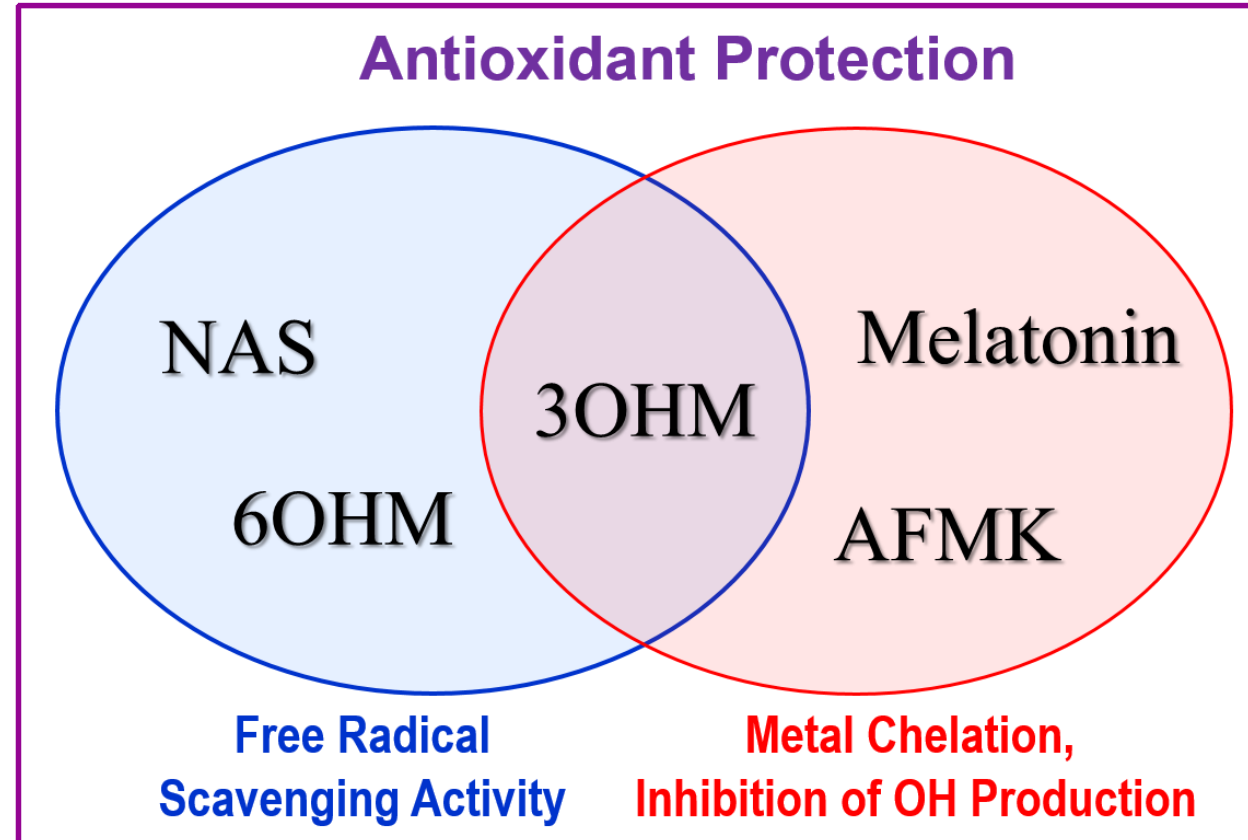
Cascade-like protection



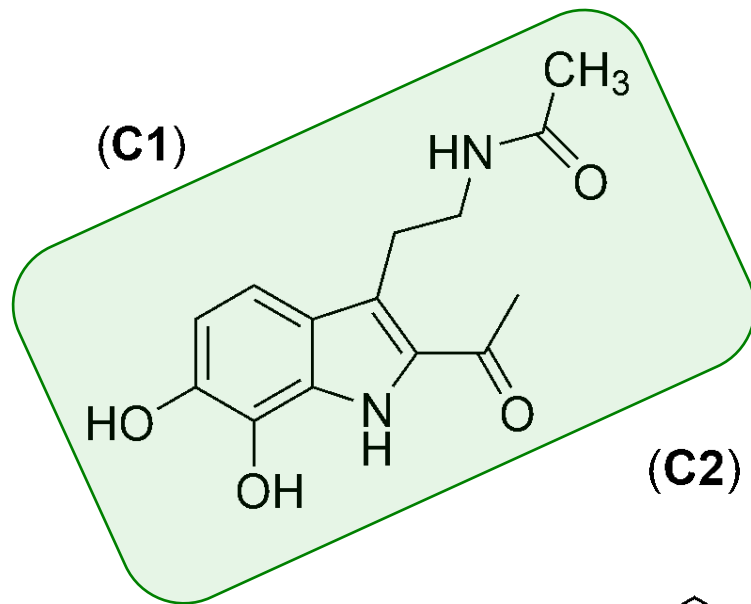
Metal ions



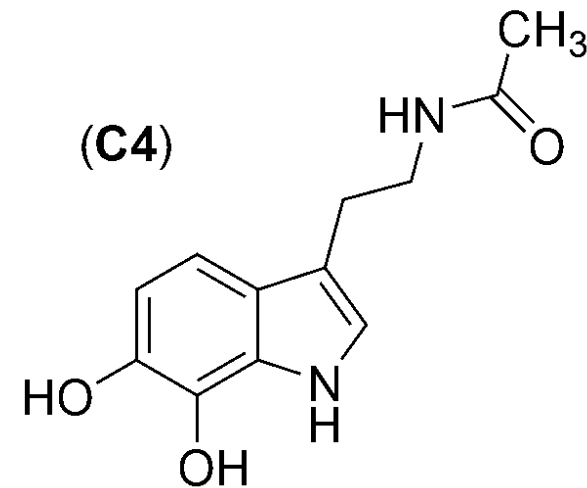
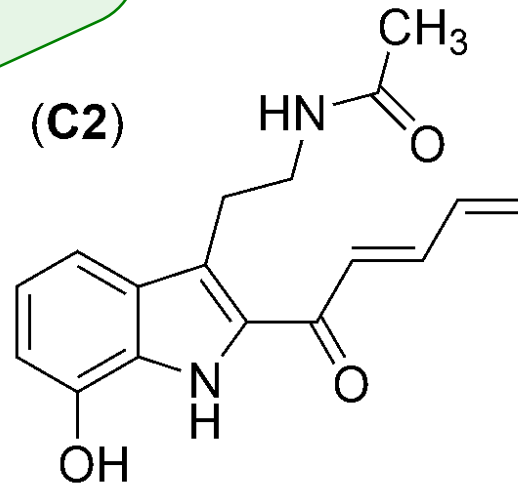
La familia de la melatonina



Diseño Computacional:

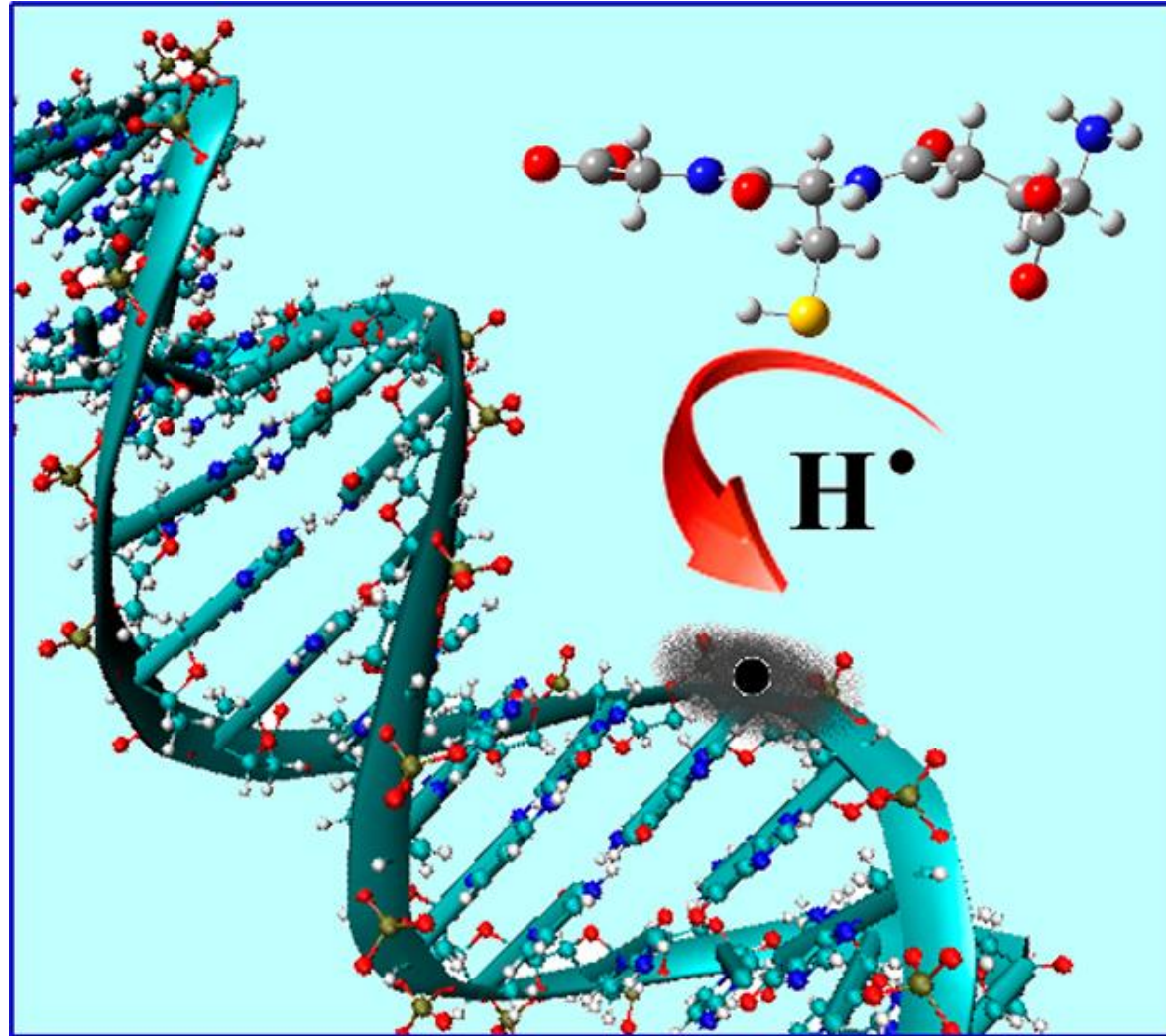


Ejemplo,
derivados de melatonina



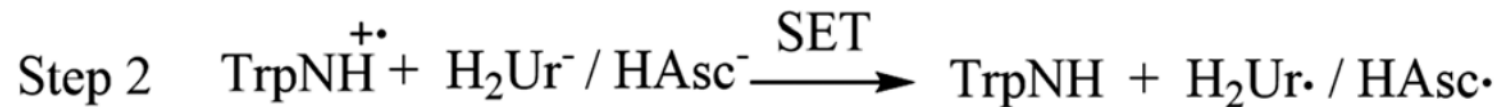
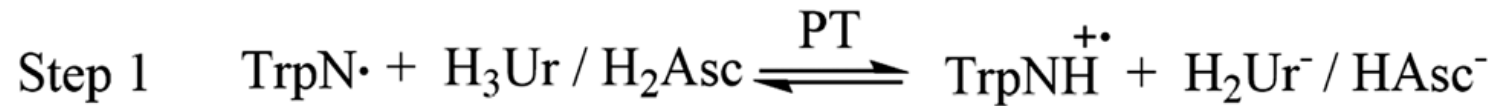
Galano A “Computational-Aided Design of Melatonin Analogues with Outstanding Multifunctional Antioxidant Capacity” *RSC Adv.* **2016**, 6, 22951 - 22963.

Reparación de bases del ADN con glutatión

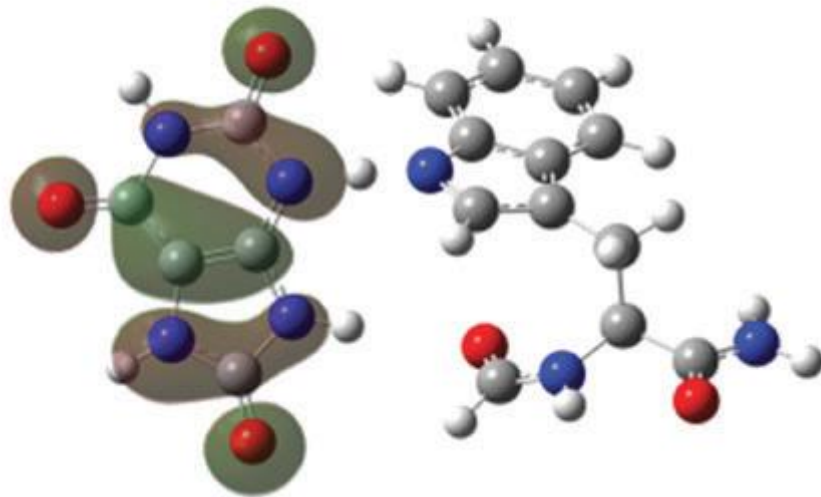


J. R. Alvarez-Idaboy, and A. Galano, *On the Chemical Repair of DNA Radicals by Glutathione: Hydrogen vs Electron Transfer*, *J. Phys. Chem. B* **2012**, 116, 9316–9325.

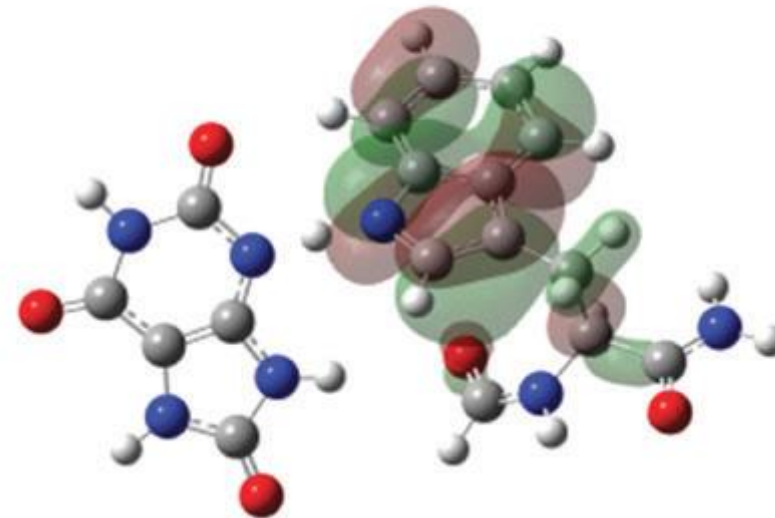
Reparación de triptofano dañado por medio de ácido úrico o ácido ascórbico



HOMO



SOMO



A FUTURO

PROYECTO FRONTERA presentado a Conacyt por la Dra Annia Galano, UAM-I

Antioxidantes Multifuncionales: del Diseño Computacional a la Aplicación Práctica

- Muchas enfermedades graves, como el mal de Alzheimer, el cáncer y la esclerosis tienen más de una causa y afectan a varios sistemas de órganos y tejidos simultáneamente
- El tratamiento convencional con varios fármacos es ineficiente: interacciones negativas.
- Diseño de una sola entidad química, con actividades biológicas múltiples.
- Desarrollo de nuevos fármacos multifuncionales "a la medida".
- Formación del primer grupo multidisciplinario en México que se sumaría al esfuerzo mundial por encontrar fármacos para enfermedades graves.

A. Galano. *Computational-Aided Design of Melatonin Analogues with Outstanding Multifunctional Antioxidant Capacity*, RSC Adv 2016, 6, 22951.



COLABORADORES



Annia Galano



Cristina Iuga



Raúl Alvarez



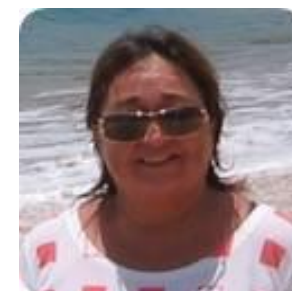
André Grand



Francisco Muñoz



Ignacio Sainz-Díaz



Elba Ortíz



Victor Hugo Uc



Nino Russo



Joaquín Ortega



Misaela Francisco

Gracias

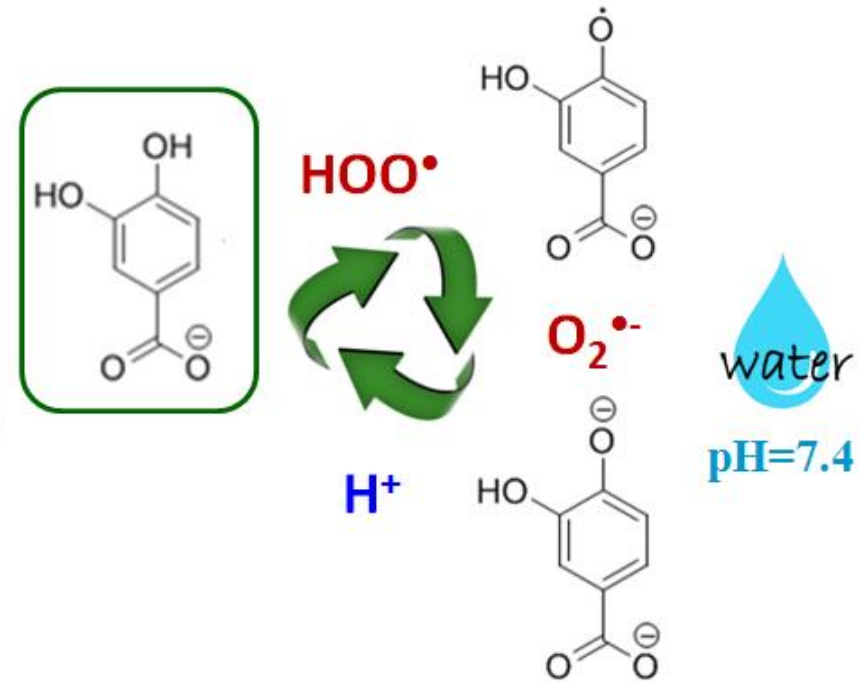


Regeneración

Los antioxidantes fenólicos (al menos los que presentan el grupo catecol en su estructura) pueden ser regenerados en medio acuoso, a pH fisiológico.

Después de desactivar el primer radical libre, y en presencia de un buen donador de electrones como por ejemplo el $O_2^{\cdot-}$, este se consume regenerando al antioxidante.

O sea que estos antioxidantes tienen la capacidad de desactivar varios equivalentes de radical libre, dos por ciclo, proporcionando protección continua hasta que el antioxidante (o alguno de los intermediarios) sea consumido por otra vía.



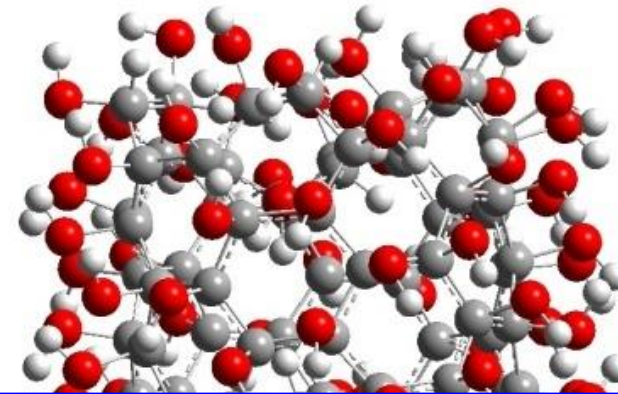
*Nanotubos de carbono como
trampas de radicales libres*

CNT como trampas de radicales libres

	ΔH_{gas}	ΔH_{sol}	ΔG_{gas}	ΔG_{sol}^{VM}
1 OH	-26.30	-29.30	-15.92	-23.35
2 OH				
I	-38.41	-39.50	-27.18	-32.70
II	-16.46	-16.65	-5.09	-9.71
III	-33.31	-39.25	-22.55	-32.92
IV	-26.82	-26.27	-15.56	-19.44
3 OH				
V	-46.18	-44.47	-34.11	-36.83
VI	-23.64	-23.30	-12.69	-16.78
VII	-35.92	-37.63	-24.95	-
4 OH				
IX	-59.24	-58.80	-46.83	-
X	-43.61	-43.26	-31.38	-

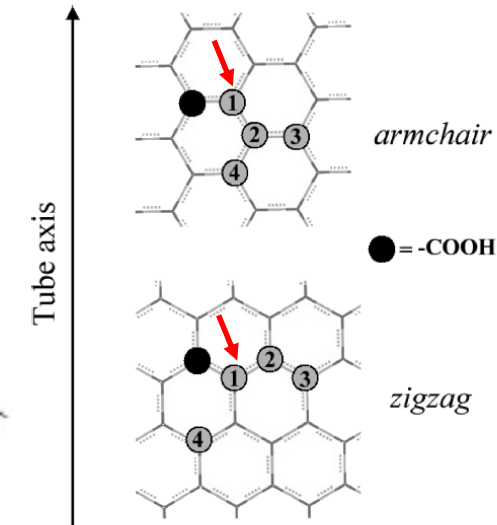
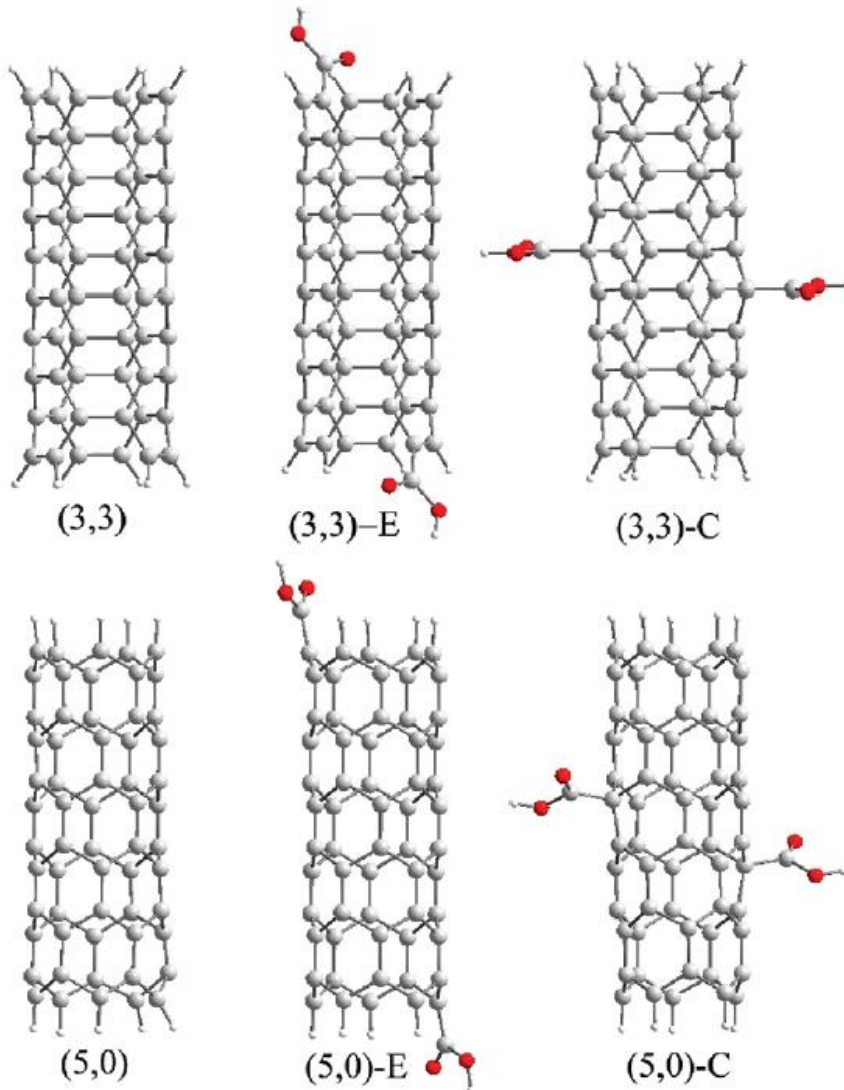
Sugiere que puede llegarse a cobertura completa:

CNTs \equiv esponjas de radicales libres



Lucente-Schultz, R. M.; Moore, V. C.; Leonard, A. D.; Price, B. K.; Kosynkin, D. V.; Lu, M.; Partha, R.; Conyers, J. L.; Tour, J. M. "Antioxidant Single-Walled Carbon Nanotubes" *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131* (11), 3934–3941

Influencia de la funcionalización carboxilados



Schematic representation of the different sites of reaction

El efecto de la carboxilación depende del sitio

En los extremos la capacidad atrapadora permanece casi igual para CNTs silla y disminuye para CNTs zigzag.

En las paredes algunos sitios se vuelven más reactivos y otros menos que en los tubos prístinos. Asumiendo que la mayor parte de las reacciones tendrán lugar en los sitios más favorecidos, se propone que la carboxilación de CNTs aumente su habilidad para atrapar radicales libres (siempre y cuando la extensión de la funcionalización sea tal que quede suficiente espacio libre en las paredes).

En todos los casos las reacciones son significativamente exergónicas, i.e. todos funcionan bien como trampas radicálicas.

Posibles Aplicaciones:



cubre bocas



filtros para cigarrillos



filtros para sistema de escape de vehiculos

???



suplemento alimenticio

Conclusiones:

- ▶ De acuerdo con los estudios realizados hasta el momento, los CNTs parecen agentes químicos **prometedores para atrapar radicales libres.**
- ▶ Se propone que su eficiencia debe ser mayor que la de otras especies químicas utilizadas con este propósito. Los CNTs actuarían como **esponjas de radicales libres.**
- ▶ La actividad de los CNTs como trampas de radicales libres se mantiene tanto en fase gas como en soluciones. Por lo tanto esta propiedad puede utilizarse en **aplicaciones tanto de interés ambiental como biológico**
- ▶ Aparentemente una mezcla de CNTs de estructuras diferentes puede ser eficiente para este propósito, por lo que **no se hace necesaria la síntesis selectiva.**
- ▶ Esta es un área de investigación muy reciente, por lo que **son necesarias muchas más investigaciones enfocadas a las preguntas que aún quedan sin resolver.**

Conclusiones Generales:

- ☺ Dar respuesta a problemas químicos concretos es el objetivo fundamental de la Química Computacional Aplicada.
- ☺ La Química Computacional ha demostrado ser una herramienta poderosa en el estudio de sistemas químicos diversos.
- ☺ Ofrece una mirada a nivel molecular de las reacciones químicas que puede contribuir a su mejor entendimiento.
- ☺ La información obtenida puede tener implicaciones en la implementación de aplicaciones prácticas.
- ☺ Se ha demostrado el carácter predictivo de la Química Computacional y su capacidad para producir datos de manera confiable.
- ☺ También se ha demostrado la importancia de estudios conjuntos teórico-experimental, directos o indirectos.

CONCENTRACIONES (EN MILLONES DE MOLÉCULAS POR CM³) DE ALGUNAS
MOLÉCULAS Y RADICALES EN LA TROPOSFERA

OH•	1
NO ₃ •	1000
HO ₂ •	10
O ₃	10 ⁶
CO	10 ⁸
SO ₂	10 ⁸
NH ₃	10 ⁴



ECORFAN®

© ECORFAN-Mexico, S.C.

No part of this document covered by the Federal Copyright Law may be reproduced, transmitted or used in any form or medium, whether graphic, electronic or mechanical, including but not limited to the following: Citations in articles and comments Bibliographical, compilation of radio or electronic journalistic data. For the effects of articles 13, 162,163 fraction I, 164 fraction I, 168, 169,209 fraction III and other relative of the Federal Law of Copyright. Violations: Be forced to prosecute under Mexican copyright law. The use of general descriptive names, registered names, trademarks, in this publication do not imply, uniformly in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protector in laws and regulations of Mexico and therefore free for General use of the international scientific community. BCIE is part of the media of ECORFAN-Mexico, S.C., E: 94-443.F: 008- (www.ecorfan.org/ booklets)