



FUNCIONALIZAÇÃO DO FULERENO C60 COM A MOLÉCULA NVP E SUA APLICAÇÃO EM TERAPIA FOTODINÂMICA

Rodrigo Rodrigues Pereira ¹, Luis Alberto Terrazos Javier ².

RESUMO

Este estudo investiga a funcionalização do fulereno C60 com N-vinilpirrolidona (NVP) para melhorar sua solubilidade em água e ampliar suas aplicações biológicas, especialmente na terapia fotodinâmica. O C60, uma molécula de carbono hidrofóbica, foi modificado para torná-lo mais acessível em meio aquoso. A análise da estrutura eletrônica do C60 funcionalizado foi realizada utilizando o software DMOL3 na plataforma Materials Studio.

A pesquisa revelou que a ligação C-C no arranjo hexagonal do C60 (1,387 Å) é mais forte que na configuração pentagonal (1,45 Å). As propriedades eletrônicas do sistema foram alteradas de semicondutor (largura de banda de 1,693 eV) para características metálicas com a adição de pirrolidina (PRY) e NVP (largura de banda de 0,053 eV). Termodinamicamente, a entropia do fulereno é de 137 J/K a 298 K, aumentando com a temperatura, enquanto a capacidade térmica é de 118 cal/mol.K e a entalpia de formação elevada ($\Delta H = 246$ kcal/mol), indicando alta estabilidade. A energia livre de Gibbs ($\Delta G = 205$ kcal/mol.K) diminui com o aumento da temperatura.

Os resultados sugerem que a funcionalização do C60 com NVP não só aumenta sua solubilidade, mas também potencializa suas propriedades eletrônicas, tornando-o mais viável para aplicações em nanomedicina e nanotecnologia.

Palavras-chave: Fulereno, N-vinilpirrolidona, funcionalização

¹Aluno da Ecit José Itamar da Rocha Candido, Cuité, PB, e-mail: rodrigorodriguespereira00@gmail.com

² Doutor, Professor, UAFM, UFCG, Cuité, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br



FUNCTIONALIZATION OF FULLERENE C60 WITH THE NVP MOLECULE AND ITS APPLICATION IN PHOTODYNAMIC THERAPY

ABSTRACT

This study investigates the functionalization of fullerene C60 with N-vinylpyrrolidone (NVP) to enhance its solubility in water and expand its biological applications, particularly in photodynamic therapy. C60, a hydrophobic carbon molecule, was modified to make it more accessible in aqueous environments. The electronic structure analysis of the functionalized C60 was conducted using DMOL3 software on the Materials Studio platform. The research revealed that the C-C bond in the hexagonal arrangement of C60 (1.387 Å) is stronger than in the pentagonal configuration (1.45 Å). The electronic properties of the system changed from semiconductor (band gap of 1.693 eV) to metallic characteristics with the addition of pyrrolidine (PRY) and NVP (band gap of 0.053 eV). Thermodynamically, the entropy of fullerene is 137 J/K at 298 K, increasing with temperature, while the heat capacity is 118 cal/mol·K and the high enthalpy of formation ($\Delta H = 246$ kcal/mol) indicates high stability. The Gibbs free energy ($\Delta G = 205$ kcal/mol·K) decreases with increasing temperature, following the relation $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$.

The results suggest that the functionalization of C60 with NVP not only increases its solubility but also enhances its electronic properties, making it more viable for applications in nanomedicine and nanotechnology.

KEYWORDS: fullerene, N-vinylpyrrolidone, functionalization