



CARACTERIZAÇÃO E FUNCIONALIZAÇÃO DE AMINOÁCIDOS EM NANOESTRUTURAS 3D DE CARBONO: EXPLORANDO A QUÍMICA QUÂNTICA EM SISTEMAS NANOBIOMOLECULARES.

Alana Souza Rodrigues¹, Nilton Ferreira Frazão ²

RESUMO

Esta pesquisa visa aprofundar o conhecimento sobre aminoácidos apolares – alanina, prolina, valina e leucina – e melhorar seu transporte intracelular. Utilizando simulações computacionais, o estudo foca na análise da estrutura desses aminoácidos e suas interações com nanotubos de carbono, buscando otimizar o transporte através das membranas celulares. Aminoácidos são essenciais na constituição das proteínas e em funções fisiológicas como desenvolvimento muscular e regulação do humor, com alguns sendo essenciais e obtidos via alimentação. A pesquisa destaca os apolares devido à sua interação eficiente com nanotubos de carbono, facilitando o transporte intracelular. Dividido em duas etapas, inicialmente, as simulações computacionais investigam a estrutura dos aminoácidos; em seguida, explora-se o uso de nanotubos de carbono como veículos de transporte, utilizando o C60 para analisar a adsorção dessas moléculas. O objetivo final é desenvolver métodos eficazes para o transporte intracelular dos aminoácidos, oferecendo novas perspectivas para terapias médicas e avanços na farmacologia. A análise mostrou que os aminoácidos possuem propriedades elétricas semelhantes e sensibilidade aos métodos de análise, com mudanças geométricas impactantes e padrões consistentes revelados por análises vibracionais e orbitais. Além disso, a curva potencial indicou uma interação forte entre a leucina e o fullereno C60, sugerindo uma maior afinidade de adsorção e estabilidade nessa combinação, juntamente com o potencial quântico que propôs o mesmo resultado.

Palavras-chave: Aminoácidos apolares, Nanotubos de carbono, Pesquisa, Simulações computacionais.

¹Alana Souza Rodrigues, Unidade Acadêmica de Física e matemática, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: alana.souza@estudante.ufcg.edu.br

²Doutor, professor da Unidade Acadêmica de Física e Matemática do Centro de Educação e Saúde - CES, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: nilton.ferreira@professor.ufcg.edu.br

CHARACTERIZATION AND FUNCTIONALIZATION OF AMINO ACIDS IN 3D CARBON NANOSTRUCTURES: EXPLORING QUANTUM CHEMISTRY IN NANOBIOMORECULAR SYSTEMS.

ABSTRACT

This research aims to deepen knowledge about nonpolar amino acids – alanine, proline, valine and leucine – and improve their intracellular transport. Using computer simulations, the study focuses on analyzing the structure of these amino acids and their interactions with carbon nanotubes, seeking to optimize transport across cell membranes. Amino acids are essential in the constitution of proteins and in physiological functions such as muscle development and mood regulation, with some being essential and obtained through food. The research highlights nonpolar ones due to their efficient interaction with carbon nanotubes, facilitating intracellular transport. Divided into two stages, initially, the computer simulations investigate the structure of amino acids; then, the use of carbon nanotubes as transport vehicles is explored, using C60 to analyze the adsorption of these molecules. The ultimate goal is to develop effective methods for the intracellular transport of amino acids, offering new perspectives for medical therapies and advances in pharmacology. The analysis showed that the amino acids have similar electrical properties and sensitivity to the analysis methods, with striking geometric changes and consistent patterns revealed by vibrational and orbital analyses. Furthermore, the potential curve indicated a strong interaction between leucine and C60 fullerene, suggesting a higher adsorption affinity and stability in this combination, together with the quantum potential that proposed the same result.

Keywords: Nonpolar amino acids, Carbon nanotubes, Research, Computational simulations.