



ESTUDO DA FUNCIONALIZAÇÃO DO FULERENO LIGADOS A ÁCIDOS CARBOXÍLICOS COMO AGENTES NEUROPROTETORES

Ana Beatriz Souto Fonseca¹, Manoel Rennan Libânio da Silva¹, Luís Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O carbono é um elemento versátil e onipresente na natureza, com a notável capacidade de formar uma variedade de alótropos, desde o rígido diamante até o grafite condutor de electricidade. No entanto, os fulerenos, como o C₆₀, representam uma classe especial de alótropos, que são moléculas esféricas compostas exclusivamente por átomos de carbono. Essas estruturas, com sua notável simetria e propriedades intrínsecas, têm atraído atenção crescente na pesquisa científica e biomédica. A funcionalização do fulereno C₆₀ com ácido carboxílico como demonstrado neste estudo, emerge como uma área promissora, principalmente no contexto das doenças neurodegenerativas que representam um desafio significativo para a saúde global. A capacidade do fulereno C₆₀ funcionalizado de se ligar a radicais livres e neutralizá-los oferece uma nova abordagem terapêutica para tratar e prevenir essas condições debilitantes. A funcionalização do fulereno C₆₀ com ácido carboxílico foi investigada, resultando em uma molécula altamente modificada e estável, como indicado por energias de ligação negativas. Além disso, a análise do HOMO-LUMO revelou uma diferença de energia menor no fulereno funcionalizado (0,324 eV), sugerindo seu potencial na neutralização de radicais livres e proteção contra doenças neurodegenerativas, como Parkinson e Alzheimer. Assim, quando um fulereno está ligado aos seis ácidos carboxílicos possuindo uma Energia de ligação de -470,07 eV, desse modo esse estudo abre caminho para pesquisas e aplicações futuras na área biomédica.

Palavras-chave: Fulereno C₆₀; Funcionalização; Radicais livres; Doenças neurodegenerativas.

¹Aluna da ECI Orlando Venâncio dos Santos, Cuité, PB, e-mail: biafonseca3@gmail.com

¹Aluno da ECI Orlando Venâncio dos Santos, Cuité, PB, e-mail: manoel.libanio1605@gmail.com

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

**STUDY OF THE FUNCTIONALIZATION OF FULLERENES LINKED TO
CARBOXYLIC ACIDS AS NEUROPROTECTIVE AGENTS.**

ABSTRACT

Carbon is a versatile and ubiquitous element in nature, with the remarkable ability to form a variety of allotropes, from rigid diamond to electrically conductive graphite. However, fullerenes, such as C₆₀, represent a special class of allotropes, which are spherical molecules composed exclusively of carbon atoms. These structures, with their remarkable symmetry and intrinsic properties, have attracted increasing attention in scientific and biomedical research. The functionalization of C₆₀ fullerene with carboxylic acids as demonstrated in this study, emerges as a promising area, especially in the context of neurodegenerative diseases that represent a challenging significant for global health. The ability of functionalized C₆₀ fullerene to bind free radicals and neutralize them offers a new therapeutic approach to treating and preventing these debilitating conditions. The functionalization of C₆₀ fullerene with carboxylic acid was investigated, resulting in a highly modified and stable molecule, as indicated by negative binding energies. Furthermore, HOMO-LUMO analysis revealed a smaller energy difference in the functionalized fullerene (0.324 eV), suggesting its potential in neutralizing free radicals and protecting against neurodegenerative diseases such as Parkinson's and Alzheimer's. Thus, when a fullerene is linked to the six carboxylic acids with a binding energy of -470.07 Ev, this study paves the way for future research and applications in the biomedical area.

Keywords: Fullerene C₆₀; Functionalization; Free radicals; Neurodegenerative diseases; Antioxidant therapy.

