



ESTUDO DA DINÂMICA MOLECULAR DA TRANSLAÇÃO DAS BASES NITROGENADAS DO DNA ATRAVÉS DE NANOPOROS DE CARBONO

Mirella Louise dos Santos Lima ¹, Antonio Ryan Leitão ², Luis Alberto Terrazos Javier ³

RESUMO

O grafeno é um importante alótropo que desperta a atenção de muitos devido por ele ser um material bidimensional, com espessura monoatômica formada por átomos de carbono, sua estrutura é de forma hexagonal, esse material possui características e propriedades indispensáveis como (alta resistência térmica, mecânica, flexível, um material fino e uma boa condutividade térmica). O grafeno favorece a leitura do DNA mais rápido por meio dos nanoporos, que são pequenos buracos abertos no meio da sua estrutura. Foram desenvolvidos três tipos de nanoporos com diâmetro diferentes, o primeiro com 5,58 Å, o segundo com 10,24 Å e o terceiro com 29,52 Å e calculamos a estrutura eletrônica dos nanoporos utilizando o programa CASTEP que está inserido na plataforma Materials Studio. Fizemos dinâmica molecular da translocação das bases nitrogenadas pelo nanoporo do grafeno utilizando o programa Forcite. Ao realizar os cálculos de dinâmica molecular cada base se encontra em distâncias diferentes de respectivamente 5,68 Å, 10,24 Å, 29,52 Å e de 24,01 Å. Na densidade de estados do nanoporo observamos que na energia de Fermi tem estados s e estados p e a medida que a dimensão do nanoporo vai aumentando o número de estados s na energia de Fermi vai aumentando.

Palavras-chave: Grafeno, Nanoporo, Dinâmica molecular;

¹Aluna da Ecit José Itamar da Rocha Candido, Cuité, PB, e-mail: louisemirella20@gmail.com ² Aluno do Instituto o Pequeno Doutor, Cuité, PB, e-mail: ryan282004@gmail.com

³ Doutor, Professor, UAFM, UFCEG, Cuité, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br

STUDY OF THE MOLECULAR DYNAMICS OF THE TRANSLATION OF NITROGEN BASES OF DNA THROUGH CARBON NANOPORES

ABSTRACT

Graphene is an important allotrope that attracts significant attention due to its two-dimensional structure, monoatomic thickness consisting of carbon atoms, and hexagonal lattice arrangement. This material possesses indispensable characteristics and properties such as high thermal and mechanical resistance, flexibility, thinness, and excellent thermal conductivity. Graphene facilitates faster DNA sequencing through nanopores, which are small openings within its structure. Three types of nanopores with different diameters were developed: the first with a diameter of 5.58 Å, the second with 10.24 Å, and the third with 29.52 Å. We calculated the electronic structure of these nanopores using the CASTEP program integrated into the Materials Studio platform.

We conducted molecular dynamics simulations of the translocation of nitrogenous bases through the graphene nanopores using the Forcite program. During the molecular dynamics calculations, each base was found to be at different distances from the nanopores, specifically 5.68 Å, 10.24 Å, 29.52 Å, and 24.01 Å.

In the density of states of the nanopore, we observed that there are both s and p states at the Fermi energy, and as the nanopore dimensions increase, the number of s states at the Fermi energy also increases.

Keywords: Graphene, Nanopore, Molecular dynamics;

