



CARACTERIZAÇÃO E FUNCIONALIZAÇÃO DE AMINOÁCIDOS EM NANOESTRUTURAS 3D DE CARBONO TIPO C_x ($x = 50, 60$ e 70)

Bruna Gerlane Marques Florentino¹, Nilton Ferreira Frazão²

RESUMO

Os aminoácidos são as unidades estruturais fundamentais das proteínas e peptídeos, e são essenciais para o corpo humano. A funcionalização com aminoácidos aumenta a solubilidade de fulerenos em água e soluções aquosas, por isso, apresenta várias aplicações, especialmente as biológicas. Nesse sentido, este trabalho tem como objetivo caracterizar as moléculas de aminoácidos essenciais apolares (alanina, isoleucina, fenilalanina e valina) e sua funcionalização com fulerenos C_{50} , C_{60} e C_{70} , por meio de simulações computacionais baseadas na Dinâmica Molecular (com o UFF) e na DFT (com LDA-PWC e GGA-PBE). Inicialmente, realizou-se a caracterização estrutural de cada molécula de aminoácido isolada, apresentando os comprimentos de ligação, os ângulos de ligação e torção, o estudo dos orbitais moleculares de fronteira, da densidade de estados e das propriedades da adsorção dos aminoácidos com os fulerenos por meio do cálculo das energias potenciais de interação em função da distância entre os respectivos centroides, tanto quântica quanto classicamente. Como resultado, o funcional GGA-PBE apresentou a menor energia para os quatro aminoácidos. Foi observada uma predominância dos orbitais HOMO no grupo amino e do orbital LUMO na carbonila e no anel fenil (para fenilalanina). A simulação com os fulerenos C_{60} e C_{70} junto as moléculas de aminoácidos foram bem sucedidos, exceto com C_{50} pois ele é muito instável e as ligações foram quebradas no cálculo quântico. Assim, os resultados obtidos por meio das simulações foram satisfatórios e permitiram obter as propriedades dos aminoácidos estudados e da sua adsorção com fulerenos, visando o aumento da solubilidade dos fulerenos.

Palavras-chave: Aminoácidos, Fulereño, Funcionalização.

¹Aluna do curso de Licenciatura em Física, da Unidade Acadêmica de Física e Matemática do Centro de Educação e Saúde - CES, UFCG, Cuité, PB, e-mail: bruna.gerlane@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 OF TYPE CX ($x = 50, 60$, and 70)

ABSTRACT

Amino acids are the fundamental structural units of proteins and peptides, and are essential for the human body. Functionalization with amino acids increases the solubility of fullerenes in water and aqueous solutions, therefore, it has several applications, especially biological ones. In this sense, this work aims to characterize the molecules of non-polar essential amino acids (alanine, isoleucine, phenylalanine and valine) and their functionalization with C_{50} , C_{60} and C_{70} fullerenes, through computational simulations based on Molecular Dynamics (with UFF) and on DFT (with LDA-PWC and GGA-PBE). Initially, the structural characterization of each isolated amino acid molecule was carried out, presenting the bond lengths, the bond and torsion angles, the study of molecular border orbitals, the density of states and the properties of the adsorption of amino acids with fullerenes by calculating the potential energies of interaction as a function of the distance between the respective centroids, both quantum and classical. As a result, the GGA-PBE functional had the lowest energy for the four amino acids. A predominance of the HOMO orbitals in the amino group and the LUMO orbital in the carbonyl and phenyl ring (for phenylalanine) was observed. The simulation with C_{60} and C_{70} fullerenes together with amino acid molecules was successful, except with C_{50} because it is very unstable and the bonds were broken in the quantum calculation. Thus, the results obtained through the simulations were satisfactory and allowed obtaining the properties of the studied amino acids and their adsorption with fullerenes, aiming at increasing the solubility of fullerenes.

Keywords: Amino Acids, Fullerene, Functionalization.