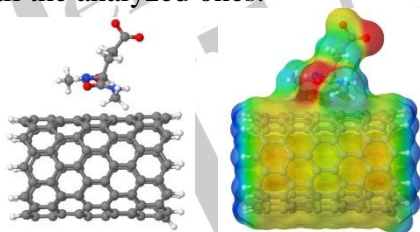


## Estudos teóricos da Interação de Nanotubos de carbono com aminoácidos

*Andrilene Celina Alves, Wanderson Knupp, Prof. Dr. Ihosvany Camps Rodriguez.*  
*Universidade Federal de Alfenas- Minas Gerais. Brasil*

### Graphical Abstract

Through system optimization, using the software MOPAC, it was possible to obtain the lowest bond energy. The picture below shows the bond with lowest energy that the best represent the system among all the analyzed ones.



CNT+Glu-

CNT+Glu-(SPE)

It is possible to see that the atoms almost interact. The lowest bond energy calculated was **-7,8502 EV**.

### Abstract

This research aims the construction of nano(bio)sensors used mostly in Medicine. On this work, nanostructures have their surfaces functionalized with organic groups, such as -OH and -COOH. After the functionalization process, the surface of these nanostructures is activated allowing a best interaction with other species. This interaction is under study using Computer Simulation and methods from the Semi-empirical theory.

### Introdução.

Este projeto tem como finalidade a construção de nano(bio)sensores para a utilização na medicina. Cada célula do nosso corpo transmite informações sobre seu estado no sangue, seja pela excreção direta de biomarcadores ou através de uma sinalização com outras células vizinhas. Devido a isso, no sangue seria possível encontrar proteínas ou moléculas específicas (biomarcadores) que nos permitiriam fazer um diagnóstico do estado completo do corpo. Caso esses biomarcadores estejam relacionados com o desenvolvimento de um tumor, por exemplo, seria possível fazer a detecção nos seus estágios iniciais, permitindo assim um tratamento mais adequado e menos invasivo. Em muitas ocasiões, os biomarcadores excretados nos estágios iniciais estão em baixíssimas concentrações, sendo necessário o uso de sensores com alta sensibilidade.

Através do programa Mopac conseguimos calcular as energias das moléculas, montadas com um sistema de nanotubo de carbono + aminoácido. O objetivo é estudar, do ponto de vista teórico, as possíveis interações e modificações ocorridas na estrutura eletrônica dos nanosensores quando os diferentes dispositivos são colocados interagindo com os biomarcadores.

### **Materiais e Métodos**

A metodologia foi dividida em alguns passos:

- 1) Escolhemos as estruturas iniciais: foi utilizado nanotubo de carbono de parede única (CNT) com quiralidade (10,0).
- 2) Funcionalização das superfícies com os grupos orgânicos e aminoácidos. As nanoestruturas selecionadas tiveram suas superfícies funcionalizadas (foram utilizados no cálculo de grupos de aminoácidos, utilizamos todos os aminoácidos conhecidos).
- 3) Determinação da estrutura: primeiro foi selecionado todos os 20 aminoácidos (no total eram 21 apenas 1 não foi encontrado no programa), no programa Ascalaph foi gerado em todos os xyz de todos as estruturas dos aminoácidos, logo depois foram montados no programa Material Studios a estrutura dos aminoácidos com o nanotubo de carbono (10,0).
- 4) Montagem da estrutura. Uma vez gerada a imagem do sistema (nanotubo+ aminoácido) em xyz no programa Ascalaph, determinamos uma distância de 3 Å do aminoácido ao nanotubos de carbono. Utilizamos o programa MOPAC (semiempíricos) para fazer os cálculos do sistema.
- 5) Otimização dos complexos: com os cálculos já feitos, tiramos informações do sistema do tipo: as energias de ligações, homo, lumo, ionização potencial, energia total, energia de dispersão. E foi montada uma tabela com todas essas informações.
- 6) Análise das imagens e arquivos e obtenção dos resultados. Com o sistema já otimizado verificamos através das imagens (usamos o Jmol para fazer as imagens dos sistemas) se houve interação entre os vários aminoácidos calculados e o nanotubos de carbono. E depois repetimos os mesmos processos para uma distância de 1,5 Å do aminoácido ao nanotubo de carbono e verificamos os resultados.

### **Programas Utilizados**

- Ascalaph Designer Link: <http://www.biomolecularmodeling.com/Ascalaph/index.html>
- Jmol Link: <http://jmol.sourceforge.net/>
- MOPAC Link: <http://openmopac.net/>

## Resultados e Discussões

A seguir temos uma tabela obtendo os dados com as menores energias de ligação do sistema.

Tabela de dados do sistema

Sistema	Energia de ligação (EV)	$\alpha$ Homo (EV)	$\alpha$ Lumo (EV)	$\beta$ Homo	$\beta$ Lumo
CntGlu-	-7,85021	-8,318	-2,363	-8,352	-1,932
CntAgr+	-6,20061	-8,020	-1,912	-6,873	-2,100
CntHis+	-6,1771	-8,013	-1,884	-6,295	-2,088

Figura1: tabela das menores energias do sistema.

A seguir temos a imagem do sistema: CNT, AMINO, CNT+AMINO e CNT (superfície de Potencial Eletrostático SPE), AMINO (SPE), CNT+AMINO (SPE).

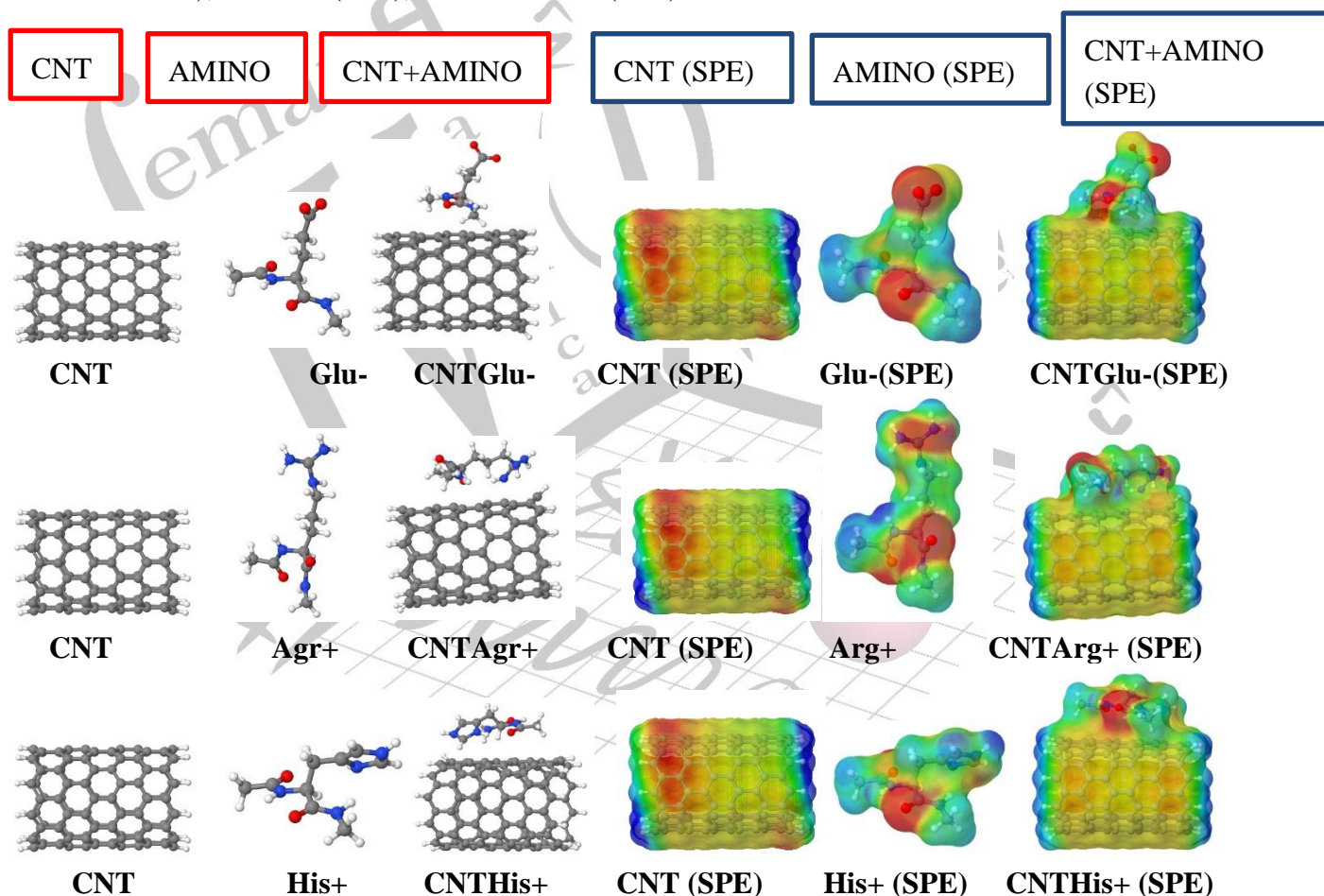


Figura 2. Representações do Sistema

As imagens na figura 2 contém um sistema CNT, nanotubo de carbono (10,0) de 120 átomos; CNT+AMINO, nanotubo de carbono mais aminoácido. Na primeira coluna, aparece a estrutura do CNT sozinho; na coluna central, o aminoácido e na terceira coluna a estrutura do CNT interagindo com aminoácidos. Na imagem a frente aparece a mesma sequência e o que modifica é a superfície de potencial eletrostático que aparece tanto no CNT sozinho, no aminoácido quanto no sistema CNT+AMINO. E como podemos verificar não houve interação.

## Conclusão

Concluimos que, apesar de o resultado não ser o que esperávamos, pois não houve interação dos átomos e como verificamos nas imagens, mas houve um aprendizado muito significativo, principalmente na utilização dos programas de modelagem computacional. Iremos fazer novos ensaios funcionalizando o CNT com -OH e -COOH, para aumentar a reatividade dos CNT e esperamos aumentar a interação do aminoácido com os nanotubos de carbono.

## Referências

- [1] J. Tamayo, P. M. Kosaka, J. J. Ruz, A. San Paulo, e M. Calleja, “Biosensors based on nanomechanical systems”, Chem. Soc. Rev., vol. 42, pp. 1287–1311, 2013.
- [2] P. Ramnani, N. M. Saucedo, e A. Mulchandani, “Carbon nanomaterial-based electrochemical biosensors for label-free sensing of environmental pollutants”, Chemosphere, vol. 143, pp. 85–98, 2016.
- [3] I. E. Tothill, “Biosensors for cancer markers diagnosis”, Semin. Cell Dev. Biol., vol. 20, pp.55–62, 2009.
- [4] P. M. Kosaka, V. Pini, J. J. Ruz, R. A. da Silva, M. U. González, D. Ramos, M. Calleja, e J. Tamayo, “Detection of cancer biomarkers in serum using a hybrid mechanical and opto- plasmonic nanosensor”, Nature Nanotech, vol. 9, pp. 1047–1053, 2014.
- [5] C. N. Rao, B. C. S. A. Govindaraj, e M. Nath, “Nanotubes”, Chem. Phys. Chem., vol. 5, pp.92–97, 2005.