

## Introdução

Esta pesquisa teve como finalidade a construção de nano(bio)sensores para a utilização na medicina. Utilizamos nanoestruturas como nanotubos de carbono e otimizamos o sistema com os aminoácidos para estudar sua interação. Esta interação foi estudada lançando mão da Modelagem Computacional usando técnicas como a teoria do semiempíricos, para que possamos criar um filtro, com finalidades médicas que permitem a detecção de câncer. Através do programa Mopac conseguimos calcular as energias das moléculas, montadas com um sistema de nanotubo de carbono + aminoácido.

## Material Utilizado

- Nanotubo de Carbono
- Aminoácido
- Acalaph

- Mopac
- Jmol

## Resultados

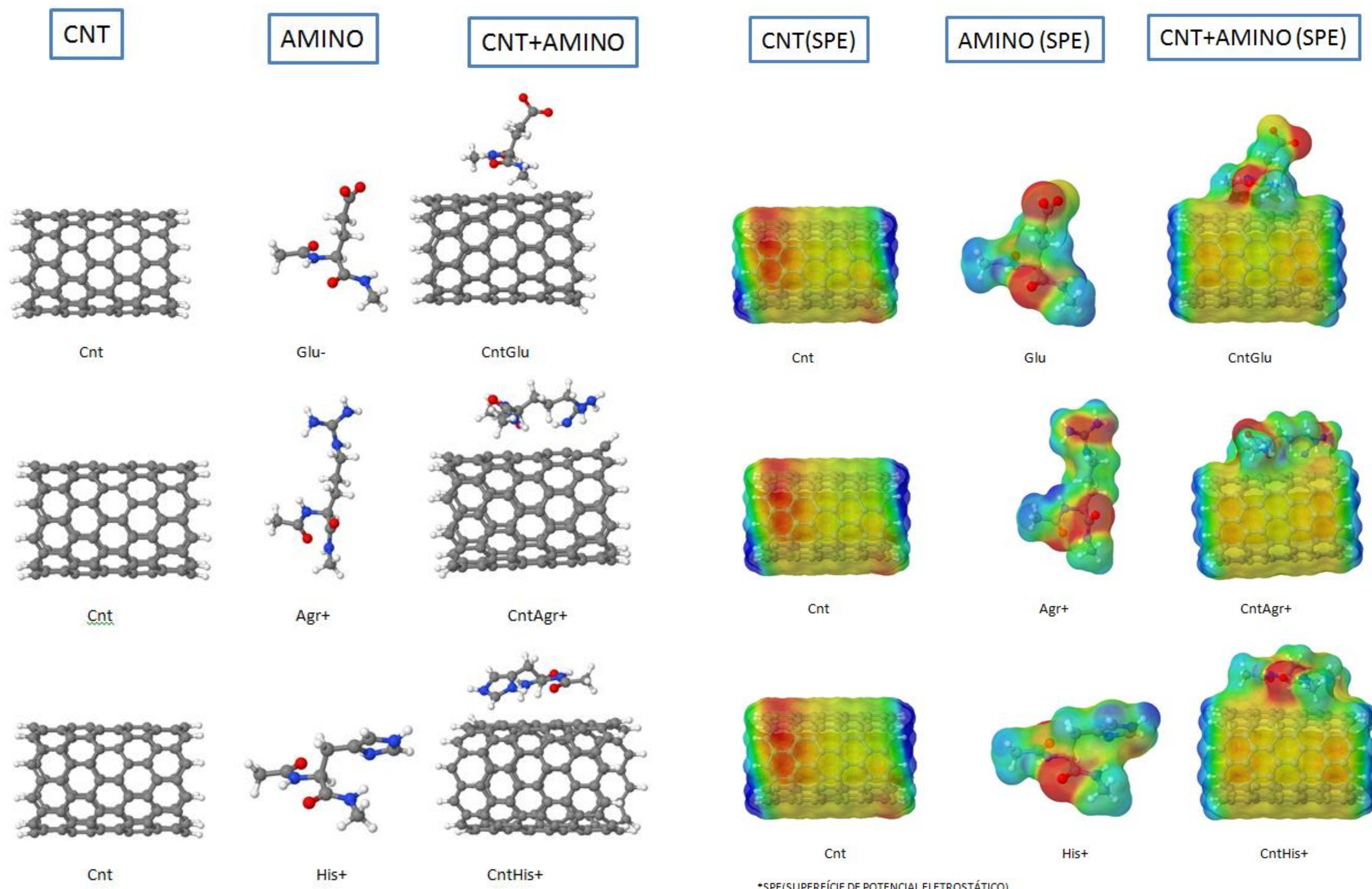


Tabela de dados do sistema

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

## Conclusão

Após a análise dos dados obtidos através da otimização do sistema pelo programa MOPAC e verificação dos átomos de valência do sistema, e das imagens concluímos que não houve nenhuma interação e ou ligação dos átomos no sistema.

## Financiamento

PIBIT CNPQ