



**FUNCIONALIZAÇÃO DE AMINOÁCIDOS HIDROFÓBICO EM
NANOESTRUTURAS DE CARBONO C₆₀: UTILIZANDO MÉTODOS DE
BIOQUÍMICA QUÂNTICA.**

Ronayde Emanuel de Lima¹, Nilton Ferreira Frazão²

RESUMO

As proteínas são macromoléculas essenciais para nosso corpo, responsáveis por diversas atividades físico-químicas de nosso sistema, isto devido a formação constituída de aminoácidos ligados por cadeias peptídicas, esses aminoácidos são de duas categorias, naturais e essenciais, sendo que os últimos não são sintetizados pelo corpo, precisando ser administrados na forma sintética. Diante disto resolvemos estudar estes aminoácidos essenciais, como biomoléculas, analisando suas propriedades estruturais, conformacionais, eletrônicas, ópticas e vibracionais por meio de simulação computacional e modelagem molecular utilizando a teoria DFT com os parâmetros da mecânica molecular clássica e os funcionais de aproximações LDA e GGA para os cálculos quânticos, mostrando que a pesquisa in silico pode fornecer resultados para o avanço de pesquisas na área, devido sua precisão na obtenção de dados e agilidade nos cálculos. Os resultados obtidos concordam com os resultados experimentais depositados nos bancos de dados e presentes na literatura com relação ao material estudado. Sugerindo a possibilidade da criação e desenvolvimento de mecanismos de entrega inteligente de drogas por meio do fulereno C₆₀.

Palavras-chave: DFT, biomoléculas, modelagem molecular.

¹Aluno do curso de licenciatura em física, Unidade acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: xadrezfreimartinho@gmail.com

²Doutor, Professor do Magistério Superior, Unidade acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: nilton.fraza@ufcg.edu.br



HYDROPHOBIC AMINO ACID FUNCTIONALIZATION IN CARBON NANOSTRUCTURES C60: USING QUANTUM BIOCHEMISTRY METHODS

ABSTRACT

Proteins are essential macromolecules for our body, responsible for various physicochemical activities of our system, this due to formation consisting of amino acids linked by peptide chains, these amino acids are of two categories, natural and essential, and the latter are not synthesized by the body, needing to be administered in synthetic form. In this way we decided to study these essential amino acids, as biomolecules, analyzing their structural, conformational, electronic, optical and vibrational properties through computational simulation and molecular modeling using the DFT theory, with the parameters of classical molecular mechanics and the functional of LDA and GGA approximations. The quantum calculations shown that in *in silico* research can provide results to the advancement of research in the area, due to its precision in obtaining data and agility in calculations. The results obtained agree with the experimental results deposited in the databases and present in the literature in relation to material studied. Suggesting the possibility of creating and developing intelligent drug delivery mechanisms by means of fullerene C60.

Keywords: DFT, biomolecules, molecular modelling.