



## **ESTUDO DA ADSORÇÃO DA PROTEÍNA HP35 NA SUPERFÍCIE DO GRAFENO**

Richard Kauê Martins Da Silva<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>

### **RESUMO**

O elemento carbono é o mais abundante na natureza e seu alotropos são o diamante, grafite, fulereno, nanotubo de carbono e o grafeno. O grafeno é uma camada de átomos que está distribuído em forma hexagonal como um favo de mel, suas propriedades eletrônicas, mecânicas e térmicas trouxe muita atenção ao mundo científico. O estudo da adsorção de proteínas na superfície de nanomateriais é importante por suas aplicações na nanotecnologia e na biomedicina. Neste trabalho estudamos a adsorção de proteína Vilina headpiece (HP35) na superfície do grafeno utilizando a dinâmica molecular clássica. Obtemos a energia de adsorção de -73.219 kcal/mol onde nos mostra a estabilidade do sistema. A estrutura da proteína se modifica ao interacionar de forma não covalente com o grafeno.

**Palavras-chave:** Grafeno, HP35, dinâmica molecular clássica.

<sup>1</sup>Aluno da ECIT Cuité Jornalista José Itamar Da Rocha Cândido, Cuite, PB, e-mail: [richardkaue321@gmail.com](mailto:richardkaue321@gmail.com)

<sup>2</sup>Doutor, Professor, UAFM, UFPG, Cuite, PB, e-mail: [lterrazo@ufcg.edu.br](mailto:lterrazo@ufcg.edu.br)



## ***STUDY OF HP35 PROTEIN ADSORPTION ON THE GRAPHEN SURFACE***

### **ABSTRACT**

The carbon element is the most abundant in nature and its allotropes are diamond, graphite, fullerene, carbon nanotube and graphene. Graphene is a layer of atoms that is distributed in a hexagonal shape like a honeycomb. Its electronic, mechanical and thermal properties have brought a lot of attention to the scientific world. The study of protein adsorption on the surface of nanomaterials is important for its applications in nanotechnology and biomedicine. In this work we study the adsorption of vilina headpiece protein (HP35) on the graphene surface using classical molecular dynamics. We obtain the adsorption energy of  $-73,219$  kcal / mol, which shows the stability of the system. The structure of the protein changes when it interacts non-covalently with graphene.

**Keywords:** Graphene, HP35, classical molecular dynamics.