



ESTUDO DA ADSORÇÃO DA PROTEÍNA HP35 NA SUPERFÍCIE DO NANOTUBO DE CARBONO.

Douglas Viniccus dos Santos da Costa¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O carbono é o elemento mais abundante da natureza e tem vários alótropos como o grafite, nanotubo de carbono, grafeno e o diamante. Os nanotubos de carbono tem uma nanoestrutura cilíndrica. Esses cilindros de átomos de carbono possuem propriedades incomuns e que são de altíssimo valor no campo da nanotecnologia, eletrônica, óptica e outros nos ramos tecnológicos da ciência dos materiais. 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 nanotubo de carbono utilizando a dinâmica molecular clássica. Obtemos a energia de adsorção de -68.058 kcal/mol onde nos mostra a estabilidade do sistema. A estrutura da proteína se modifica ao interacionar de forma não covalente com o nanotubo.

Palavras-chave: Nanotubo de carbono, HP35, Dinâmica molecular clássica.

¹Aluno do ECIT José Itamar da Rocha Candido, Cuite, PB, e-mail: dogfany0@gmail.com

²Doutor, Professor, UAFM, UFCG, Cuite, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br



STUDY OF HP35 PROTEIN ADSORPTION ON THE CARBON NANOTUBE SURFACE

ABSTRACT

Carbon is the most abundant element in nature and has several allotropes such as graphite, carbon nanotube, graphene and diamond. Carbon nanotubes have a cylindrical nanostructure. These cylinders of carbon atoms have unusual properties and are of very high value in the field of nanotechnology, electronics, optics and others in the technological fields of matter science. 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 surface of the carbon nanotube using classical molecular dynamics. We obtain the adsorption energy of $-68,058$ kcal / mol, which shows the stability of the system. The structure of the protein changes when it interacts non-covalently with the nanotube.

Keywords: Carbon nanotube, HP35, , Classical Molecular Dynamics.