

# Propriedades Estruturais e Morfológicas de Nanotubos de L-Difenilalanina

Bruno B. Cunha<sup>1</sup> (PG), Thiago C. Cipriano<sup>1,2</sup> (PG), José A. Souza<sup>1</sup> (PQ), Fábio F. Ferreira<sup>1</sup> (PQ), Wendel A. Alves<sup>\*1,2</sup> (PQ).

<sup>1</sup>Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, Santo André, São Paulo.

<sup>2</sup>Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanalítica, Caixa Postal 6154, Campinas, SP, 13083-970

[wendel.alves@ufabc.edu.br](mailto:wendel.alves@ufabc.edu.br)

Palavras Chave: Nanotubos de Peptídeos, Microperoxidase 11, DRX, FTIR, MEV.

## Introdução

Nanotubos de L-difenilalanina (NTPs) possuem propriedades químicas, biológicas e físicas interessantes. São biocompatíveis pelo fato de serem formados por aminoácidos, blocos de construção biológica através do processo de automontagem. Neste trabalho, estudou-se o comportamento do NTPs em três valores de pH e também a intercalação do fragmento de proteína microperoxidase-11 (MP11) na matriz. Atualmente, este sistema está sendo aplicado ao desenvolvimento de biossensores eletroquímicos.<sup>1,2</sup> Estudo de propriedade térmica (TG e DSC) objetivaram identificar a importância da água na formação dos NTPs. Além disso, mudanças estruturais e morfológicas foram observadas por DRX, FTIR e MEV-FEG.

## Resultados e Discussão

Propriedades estruturais dos NTPs produzidos em pH 3, 7 e 12, foram obtidas por DRX. Com o método Rietveld obtiveram-se os parâmetros estruturais dos NTPs. Através do *software* GSAS, refinou-se os dados experimentais, sugerindo os seguintes valores para esse conjunto de amostras.

**Tabela 1:** Difração de raio x em PNTs em diferentes valores de pH.

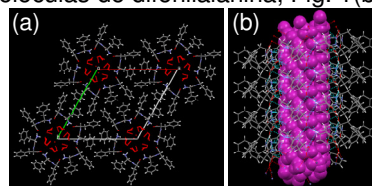
	pH 3	pH 7*	pH 12
Fórmula	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5.5</sub>
S. cristalino	Hexagonal	Hexagonal	Hexagonal
G. espacial	P6 <sub>1</sub>	P6 <sub>1</sub>	P6 <sub>1</sub>
a [Å]	24.1827(6)	24.1650(9)	24.177(1)
b [Å]	24.1827(6)	24.1650(9)	24.177(1)
c [Å]	5.432(4)	5.580(1)	5.437(3)
V	2751.06	2821.82	2752.77

\*Medidas de alta resolução, LNLS.

A intercalação da MP11 nos nanotubos pode ser evidenciada por DRX. Com a adição de MP11 o parâmetro *c* da célula unitária diminuiu em relação ao NTPs (puro). Em relação aos NTPS + MP11, o parâmetro *c* aumenta com o aumento da concentração de MP11. Os demais parâmetros não são modificados.

Identificou-se por TG e DTG a saída de água da estrutura a partir de 114°C, com degradação do material a partir de 295°C. Uma transição estrutural em torno de 140°C foi identificada por DSC. Propriedades estruturais foram posteriormente sugeridas por DRX. Identificou-se uma transição estrutural de hexagonal P6<sub>1</sub> para ortorrômbico Pmn21. Por FTIR evidenciou-se a transição estrutural assim como uma transição em relação à morfologia, pela presença das conformações β-sheet e β-turn, sugerindo uma transição de nanotubo para nanofio.

Simulações obtidas através do refinamento Rietveld sugerem que os estes nanotubos se auto-organizam em hexágonos nos vértices da cela, Fig. 1(a). A água possui nove posições para cada padrão de seis moléculas de difenilalanina, Fig. 1(b).



**Figura 1:** Célula unitária do NTPs (a); Posições dos oxigênios das moléculas de água no NTPs (b).

## Conclusões

A transição estrutural em NTPs acontece quando estes são submetidos a altas temperaturas. Análises térmicas mostraram a importância da água na estruturação dos NTPs, estando presente na fase hexagonal e ausente na fase ortorrômbica. NTPs podem servir como matrizes para MP11. Identificou-se por DRX a intercalação da MP11<sup>[1]</sup>.

## Agradecimentos

CAPES, FAPESP, LNLS, CNPq, INCT de Bioanalítica e a Pós-graduação em Nanociências e Materiais Avançados da UFABC.

<sup>1</sup> Cipriano, T. C.; Takahashi, P. M.; Lima, D.; Oliveira, V. X.; Souza, J. A.; Martinho, H.; Alves, W. A., *J. Mat. Sci.* **2010**, 45, 5101

<sup>2</sup> Alves, W. A.; Martins, T. D.; Souza, M. I.; Cunha, B. B.; Takahashi, P. M.; Ferreira, F. F.; Fileti, E.E.; *J. Phys. Chem. C* **2011**, in press.