

# Adsorção Lateral da LDOPA em Nanotubos de Carbono de Parede Simples: Um Estudo Computacional

Laudenor Amorim<sup>\*1</sup> (IC), Glaydson L. F. Mendonça<sup>1</sup> (PG), José R. C. Júnior<sup>1</sup> (PG), Pedro de Lima Neto<sup>1</sup> (PQ), Ewerton W. S. Caetano<sup>2</sup> (PG), Valder N. Freire<sup>3</sup> (PQ).

<sup>1</sup> Grupo de Química Teórica - GQT, Departamento de Química Analítica e Físico-Química - UFC.

<sup>2</sup> Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE.

<sup>3</sup> Departamento de Física - UFC.

\*quimicolaudenor@gmail.com

Palavras Chave: L-dopa, Dinâmica Molecular, Nanotubos de Carbono.

## Introdução

A Levodopa (LDOPA) é o fármaco mais utilizado no tratamento do Mal de Parkinson, mas seu uso contínuo promove diversos efeitos colaterais, tais como: vômitos, falta de apetite e psicoses. Estudos empregando moléculas de fármacos secundários vêm sendo realizados com a finalidade de minimizar ou anular estes efeitos, garantindo maior eficácia terapêutica por meio de uma liberação controlada<sup>1</sup>. Estudos anteriores de fármacos com estruturas de carbono já foram feitos pelo grupo<sup>2</sup>, mostrando a interação da LDOPA com o fulereno C<sub>60</sub>, para que a droga atue direcionada sobre a região afetada do Sistema Nervoso Central para uma possível aplicação médica mais eficiente que sozinha<sup>3</sup>. Este trabalho tem como objetivo estudar a interação da LDOPA com Nanotubos de Carbono de Parede Simples (NCPS), usando simulações de química computacional. A dinâmica molecular foi utilizada para descrever a adsorção lateral da LDOPA sobre NCPS, LDOPA@NCPS, na faixa de pH 2-8,5. Cálculos de annealing foram feitos para explorar as configurações moleculares da LDOPA@NCPS, assim obtendo geometrias ideais de adsorção.

## Resultados e Discussão

Pela distribuição dos orbitais de fronteira, observou-se que os sítios preferenciais de interação são os oxigênios terminais e o átomo de nitrogênio. Dinâmicas moleculares utilizando o software Forcite do Materials Studio versão 5.0 mostraram como a molécula interage com o nanotubo de carbono. Baseado nos dados moleculares foi estipulado uma posição inicial de interação e esta foi rotacionada de 90° em 90° nos eixos xy e yz, originando assim 16 estruturas diferentes. Foram calculados ainda os potenciais de interação para estas orientações, fixando o centróide da LDOPA com o centróide do anel central do nanotubo de carbono, variando a distância de 2,5 a 11 Å, onde se encontraram as estruturas de menor energia. A dinâmica molecular mostrou que no intervalo de tempo de 0 a 3,3 ns a LDOPA fica oscilando entre as extremidades e o centro do NCPS, após isso, estabiliza-se em um órbita definida no centro do nanotubo. A Figura 1 mostra valores de mínimos global e locais de energia obtidos para a LDOPA@NCPS.

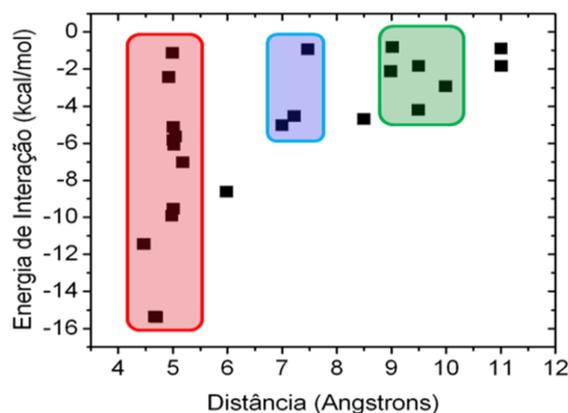


Figura 1. Pontos de menor energia dos Potenciais de Lennard-Jones da LDOPA@NCPS em função da distância.

A Fig.1 sugere que existem três níveis de adsorção. Inicialmente, a LDOPA apresentou um potencial global mínimo de  $-16,47 \text{ kcal.mol}^{-1}$  a uma distância de 4,5 Å do nanotubo. A orientação de menor energia apresentou o grupo catecol voltado para o nanotubo. Nesta orientação foi feito o relaxamento da estrutura, na qual se obteve o potencial de interação de  $-20,61 \text{ kcal.mol}^{-1}$  a uma distância de 4,575 Å da superfície do nanotubo.

## Conclusões

Ao interagir lateralmente com o nanotubo, a LDOPA não apresenta capacidade de penetração no nanotubo. A ordem de energia da interação é característica de fisissorção e foram observados três níveis de interação da LDOPA no NCPS, caracterizando assim, um bom carreador.

## Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq e à CAPES pelos auxílios financeiros.

<sup>1</sup>S.K. Sahoo et al. / Nanomedicine: Nanotechnology, Biology, and Medicine 3 (2007) 20–31.

<sup>2</sup>A. Hadad et al. / J. Phys. Chem. C (2011), 115, 24501–24511.

<sup>3</sup>G. Modi et al. / Progress in Neurobiology 88 (2009) 272–285.