

RIBEIRO; Flávio Vinícius da Silva¹, MIRANDA; Ricardo Moraes de², CORRÊA; Solange Maria Vinagre³

RESUMO

A nanotecnologia é uma ferramenta em ascensão, possibilitando o entendimento e a resolução de problemas que até então eram tidos como insolúveis, além de melhorar técnicas, contribuindo assim para o desenvolvimento tecnológico e consequentemente social. Um dos principais materiais estudados por esse campo são os chamados Nanotubos de Carbono (CNT's), estruturas cilíndricas, de escala nanométrica (10^{-9} m), podendo ser formados por átomos de carbono e hidrogênio apenas ou por alguns átomos eletronegativos conjugados no sistema; os CNT's apresentam incríveis propriedades físico – químicas tais como adsorção, reatividade e capacidade para realizar grandes interações hidrofóbicas, dentre outras propriedades importantes, fazendo desses materiais candidatos para as mais variadas aplicações, dentre elas a mediação de fármacos (drug delivery), tendo em vista que alguns medicamentos apresentam dificuldades no processo de metabolização bioquímica. Entretanto, o primeiro passo é analisar a estabilidade do complexo formado entre o fármaco e o nanotubo, o que é feito através das energias de formação e das análises das ligações formadas pelo complexo; quanto mais interações favoráveis houver entre o nanotubo e a molécula, melhor será o balanço final da energia de formação, e mais viável é o complexo. Nesse sentido, foi simulado teoricamente o ancoramento molecular (docking) entre um Nanotubo de Carbono de quiralidade armchair 7,7 funcionalizado com um átomo de enxofre (SCNT), tendo que em vista que a adição de átomos eletronegativos na estrutura do nanotubo podem melhorar suas interações eletrônicas devido a presença de elétrons livres nestes átomos, e uma molécula do fármaco Fluoxetina (C₁₇H₁₈F₃NO), popularmente conhecido como Prozac, buscando analisar a estabilidade do complexo, visando futuras otimizações na ação desse fármaco; a simulação foi realizada no programa AutoDock.1.5.6, usando o como parâmetros de cálculo o Algoritmo Genético Lamarckiano (LGA), com 7 torções no ligante e 100 corridas de cálculo. Os resultados foram analisados através dos programas Pymol 2.4 para geração das imagens e pelo pacote DiscoveryStudio 21 para análise das interações do complexo. Das 100 corridas, a melhor conformação obteve um valor de energia livre de -23,23 KJ/mol, mostrando que o complexo [SCNT-C₁₇H₁₈F₃NO] apresenta estabilidade, contendo um total de 65 interações, sendo as principais: 2 pontes de hidrogênio, 2 ligações hidrofóbicas não clássicas (pi – alquila), e uma micela formadas entre os átomos de carbono do nanotubo e de flúor da Fluoxetina, que contribuem fortemente para a estabilização do complexo. De acordo com a literatura, as interações presentes são fundamentais para a estabilização de complexos orgânicos. Por fim, as análises realizadas mostraram que a estrutura SCNT- FX apresenta estabilidade química do ponto de vista energético e estrutural, fazendo dos nanotubos dopados de quiralidade armchair bons candidatos a drug delivery, o que abre caminho para futuros estudos desse complexo interagindo com macromoléculas biológicas receptoras de Fluoxetina.

PALAVRAS-CHAVE: Nanotecnologia, Docking, Fluoxetina, Nanotubos

¹ Instituto Federal do Pará - IFPA, flsilvaribeiro@gmail.com

² Campus Belém, ricardo.miranda@ifpa.edu.br

³ Instituto Federal do Pará - IFPA, solange.correa@ifpa.edu.br