

## Estudo de primeiros princípios de nanoestruturas do tipo 2D como sensores biológicos

Alice Bordignon Vian<sup>1</sup>, Cássio Stein Moura<sup>1</sup> (orientador), Ivi Valentini Lara<sup>1</sup> (coorientadora).

<sup>1</sup>*Escola de Ciências, PUCRS.*

### Resumo

Atualmente, o estudo das propriedades de nanoestruturas vem atraindo o interesse na comunidade científica e observa-se uma promissora aplicabilidade destas como sensores de bioelementos, o que pode possibilitar a evolução de estudos e diagnósticos biológicos a nível molecular. Logo, o objetivo deste trabalho é simular computacionalmente a interação de nanomateriais como o grafeno, fosforeno e futuramente borofeno, com biomoléculas para analisar suas propriedades químicas e físicas verificando-se sua possível aplicação como sensores biológicos. Desta forma surge a necessidade de se compreender as propriedades eletrônicas e estruturais resultantes dessa interação. Neste sentido, o método de análise utilizado se deu a partir de cálculos de primeiros princípios baseados na teoria do funcional da densidade (DFT), utilizando o código SIESTA. Em prol de se otimizar o tempo de simulação foram analisados somente os aminoácidos e dipeptídeos com maior tendência à interação com o grafeno de acordo com o método de docagem molecular aplicado em um projeto preliminar a este “Estudo teórico de nanoestruturas de carbono, fósforo e boro como sensores biológicos”, PRAIAS 2017. Nossas simulações denotam que a interação entre as biomoléculas de interesse e as monocamadas de fosforeno e grafeno se dá através de adsorção física. Essa adsorção mostrou-se mais favorável energeticamente através do grupo carboxílico para a interação com o aminoácido acíclico valina e, com relação ao grafeno puro, para aromáticos, como triptofano, tirosina e fenilalanina, devido à tendência de superposição dos anéis dessas moléculas como ocorre no grafite. Ademais, com relação às propriedades eletrônicas das interações observou-se que, em especial para os dipeptídeos, níveis de energia se sobrepõem ao último nível de energia ocupado das nanoestruturas, com tendência à modulação do gap de bandas de energia. Análises mais intrincadas dos sistemas e estruturas de bandas de energia estão sendo realizadas para verificar o perfil de interação entre cada molécula e as duas nanoestruturas. Com esse trabalho,

observa-se algumas das tendências de interação das nanoestruturas, como por exemplo a do fosforeno interagir com átomos de oxigênio e do grafeno com átomos de carbono sobretudo dispostos de modo que os anéis aromáticos se sobreponham. Estão sendo realizados cálculos preliminares com a monocamada de borofeno para avaliar também seu potencial como sensor de biomoléculas.

**Palavras-chave:** Nanomateriais; biomoléculas; simulação; análise de propriedades.