



16, 17 e 18 de novembro de 2016.  
Campina Grande, Paraíba, Brasil

## CARACTERIZAÇÃO DOS AMINOÁCIDOS ESSENCIAIS APOLARES E A FUNCIONALIZAÇÃO EM NANOESTRUTURAS DE CARBONO: UTILIZANDO MÉTODOS QM/MM PARA SISTEMAS NANOBIMOLECULARES

Jessé Medeiros Pontes<sup>1</sup>, Nilton Ferreira Frazão<sup>2</sup>

### RESUMO

Os aminoácidos são estruturas quaternárias compostas pelo Carbono (C), Oxigênio (O), Hidrogênio (H) e o Nitrogênio (N), em alguns casos o enxofre (S). Eles são fundamentais para construir proteínas e enzimas. Os atletas são os principais beneficiários com a suplementação de aminoácidos, pois eles ajudam em diversas funções no organismo humano, tais como a reparação e desenvolvimento do tecido muscular; sistemas neurológicos entre outros. Neste estudo, investigaram-se os aminoácidos essenciais apolares que são representados pela fenilalanina, triptofano, leucina, isoleucina, metionina, valina e treonina. Foram utilizados cálculos clássicos para explorar as configurações moleculares dos aminoácidos apolares, que nos dar a melhor geometria, através do campo de força universal. Os cálculos de otimização quântica foram feitas usando dois diferentes funcionais (LDA e GGA) da teoria do funcional da densidade (DFT). Para apresentar os resultados optoeletrônicos fizemos análises populacional por meio de três métodos diferentes (MPA, HPA e ESP) bem como, os espectros de absorção óptica foram calculados. O estudo do orbital molecular (HOMO e LUMO) foram obtidos considerando a conformação de menor energia de todas as moléculas. Os espectros Infravermelho e Raman nos permitiram determinar as assinaturas vibracionais dos aminoácidos. Todos os cálculos foram realizados por meio do código do programa DMol3 e Forcite.

**Palavras-chave:** aminoácidos, teoria do funcional da densidade, propriedades optoeletrônicas.

<sup>1</sup>Graduando em Engenharia Elétrica, UAFM, UFCG, Cuité, PB, e-mail: jessemedeiros.ct@hotmail.com

<sup>2</sup>Física – UFRN, Doutor, UAFM, UFCG, Cuité, PB, e-mail: nilton.frazao@ufcg.edu.br



16, 17 e 18 de novembro de 2016.  
Campina Grande, Paraíba, Brasil

**CHARACTERIZATION OF THE APOLAR ESSENTIAL AMINO ACIDS AND  
FUNCTIONALIZATION OF CARBON NANOSTRUCTURES: USING QM/MM METHODS  
TO NANOBIOMOLECULES SYSTEMS**

**ABSTRACT**

Amino acids are quaternary compounds structured by carbon (C), oxygen (O), hydrogen (H), and nitrogen (N), but in some cases, the sulfur (S) is necessary. They are fundamental to build up proteins and enzymes. Athletes are the main beneficiaries with supplemental amino acids as they help in various functions in the human body, such as repair and development of muscle tissue; neurological systems among others. In this study, we investigated the apolar essential amino acids being represented by phenylalanine, tryptophan, leucine, isoleucine, methionine, valine, and threonine. The classical annealing was performed to explore the molecular configurations of the polar amino acids, looking for the best geometry, through the universal force field. The quantum optimization calculations were performed using two different levels of combination (LDA and GGA) of the density functional theory of functional (DFT). To present the optoelectronic results we made the population analyses using three different methods (MPA, HPA, and ESP), as well as, the optical absorption spectrum were calculated. The study of molecular orbital (HOMO and LUMO) were obtained considering the conformation of less optimized energy of the seven molecules. Infrared absorption and Raman scattering spectra of the three configurations were evaluated, allowing determining vibrational signatures. All the calculations were performed through the DMol3 and Forcite program code.

**Keywords:** amino acids, density functional theory, optoelectronics properties.