
Investigação Teórica de Confórmeros Estáveis para o Sistema C₅₉Al-CBZ

FLÔR, Pedro Soares H. (IC)¹

Instituto Federal de Goiás, Câmpus Jataí, Grupo de Modelagem Computacional de sistemas Físicos, Atômicos e Moleculares- GMCFAM.

LEMOS SILVA, Rodrigo A. (PQ)²

Instituto Federal de Goiás, Câmpus Jataí, Grupo de Modelagem Computacional de sistemas Físicos, Atômicos e Moleculares- GMCFAM

Este trabalho apresenta uma investigação teórica sobre a estabilidade e as propriedades eletrônicas de confórmeros do sistema C₅₉Al-CBZ. O estudo visa contribuir para o desenvolvimento de materiais avançados, especificamente na área de nanotecnologia ambiental, com foco na captura e remoção da carbamazepina (CBZ). A contaminação de recursos hídricos por fármacos, como a CBZ, representa um desafio ambiental significativo e risco relevante de saúde pública. A CBZ, um medicamento psicoativo amplamente utilizado, é um dos poluentes mais persistentes encontrados em águas residuais, devido à sua alta resistência a processos convencionais de tratamento e baixa solubilidade em água. Sua presença em corpos d'água excede concentrações ecologicamente seguras. Os fulerenos, em particular, tem atraído a atenção, como alternativa para captura e remoção desse tipo de poluente, dentre outros. Estudos prévios demonstraram que a dopagem de fulerenos com metais pode aumentar significativamente sua capacidade de adsorção de contaminantes orgânicos, como evidenciado pela interação de fulerenos dopados com gálio (Ga) e a CBZ, que revelou múltiplos estados ligados prováveis. O objetivo principal deste presente trabalho, foi aplicar a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para explorar a estabilidade de novos

conformers do sistema C₅₉Al-CBZ. A metodologia empregou um scan rígido para mapear a energia de interação do sistema, variando a posição relativa da CBZ em relação ao fulereno dopado em 360°. Foram calculados 12 passos de interação, com variação angular de 30° a cada passo. Os resultados revelaram a existência de três conformers estáveis. As energias de adsorção mais negativas foram consistentemente observadas nos ângulos de torção de 0°, 120° e 270°, indicando uma alta afinidade entre o fulereno dopado com alumínio e a molécula da CBZ. Para uma análise mais detalhada, os dados discretos da energia de interação foram ajustados a uma curva contínua utilizando um modelo de Fourier não linear. A qualidade do ajuste foi confirmada por valores de χ^2 e R² próximos de zero e um, respectivamente. A estabilidade desses conformers foi corroborada pela análise dos pontos críticos e da derivada segunda da curva de energia, que confirmaram a presença de mínimos locais no perfil energético. Além do conformer inicial (0°), foram identificados mínimos locais significativos em ângulos de torção de aproximadamente 127,46° e 259,84°, com energias de interação de -60,1487 Kcal/mol e -61,7067 Kcal/mol, respectivamente. Um mínimo global foi encontrado em 358,20°, correlacionado ao conformer de 0°. A análise da distribuição de Boltzmann demonstrou que, em temperatura ambiente (298 K), o conformer com ângulo de torção de 0° e energia de interação de -63,90 Kcal/mol é o mais prevalente, com uma probabilidade de ocorrência de 97,1%. Futuros estudos visam incluir o cálculo de barreiras energéticas e a caracterização das interações intermoleculares por métodos como QTAIM e RGD.

Palavras-chave

Captura de poluentes, Carbamazepina, Fulerenos Dopados, Análise teórica computacional.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio do Instituto Federal de Goiás, do Grupo de Modelagem Computacional de sistemas Físicos, Atômicos e Moleculares - GMCFAM e com o suporte do Laboratório de Modelagem Computacional de sistemas Físicos, Atômicos e Moleculares – LMC FAM e do Centro de Computação de Alto Desempenho da UEG.