

RESUMO - MODELAGEM DE MATERIAIS

PONTO QUÂNTICO DE CARBONO PARA SISTEMAS EFICIENTES DE LIBERAÇÃO DE ÓXIDO NÍTRICO: INVESTIGAÇÃO DAS TRANSIÇÕES ELETRÔNICAS E DO EFEITO DO PH.

Henrique Rodrigues Souza Silva (henrique.r.silva@unesp.br)

Orisson Gomes (orisson.gomes@unesp.br)

Augusto Batagin Neto (a.batagin@unesp.br)

Paulo Lisboa (paulo.lisboa@unesp.br)

Os pontos quânticos de carbono (Carbon Dots, CDs) têm recebido crescente atenção devido às suas relevantes propriedades ópticas e eletrônicas intrínsecas, que podem ser ajustadas por meio de uma variedade de modificações químicas. Uma das principais vantagens dos CDs é sua alta solubilidade em água, o que os torna compostos muito atrativos para aplicações biomédicas, incluindo sistemas de liberação de fármacos. A eficiência dos processos de liberação pode ser afetada por diversos fatores, envolvendo interações específicas entre os CDs e as espécies químicas presentes no meio. Neste estudo, investigamos, por meio de técnicas de modelagem molecular, um sistema modelo de CD projetado para a liberação de óxido nítrico (NO), contendo ligantes à base de trifetilfosfônio (TEP) e cisteína, recentemente

reportado como um sistema promissor para induzir apoptose em células tumorais. Cálculos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) foram realizados para investigar a reatividade química local e as propriedades optoeletrônicas desses sistemas em diferentes condições. Os resultados destacam a importância de se considerar a influência do pH e do estado de desprotonação para a formação efetiva dos adutos de NO, além de indicar a natureza das transições eletrônicas responsáveis pela liberação do radical.

Palavras-chave: pontos quânticos de carbono; óxido nítrico; sistemas de liberação; modelagem molecular; teoria do funcional da densidade (dft); transições eletrônicas; efeito do ph.