



## ESTUDO DA LIGAÇÃO DOS FARMACOS DOXORRUBICINA E CAMPTOTECINA NO GRAFENO FUNCIONALIZADO COM A MOLECULA ÁCIDO FÓLICO<sup>1</sup>

Rayssa Evellyn Santos Lima<sup>1</sup>, Luiz Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>

2

### RESUMO

O grafeno é um material que vem chamando cada vez mais atenção no mundo científico por ser um material resistente, rígido, condutor e flexível e quando funcionalizado pode ser utilizado como um nanocarreador para fármacos.

Nos funcionalizamos a folha de Grafeno com o FA e calculamos sua energia de adsorção, depois juntamos a folha funcionalizada com dois fármacos: DOX e CPT e calculamos novamente a sua energia, na intenção de descobrir a melhor configuração. A energia da Folha de Grafeno+FA resultou em  $-49,366$  kcal/mol e já o da Folha de Grafeno+FA+DOX+CPT resultou em  $-105,240$  kcal/mol e assim observamos que a energia da folha ao adicionar os fármacos se tornou mais estável.

### Palavras-chave:

Alótropos de carbono, Grafeno, Doxorubicina, Camptotecina

---

<sup>1</sup>

<sup>2</sup>Doutor, Professor, UAFM UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br



## STUDY OF THE LINKAGE OF DOXORRUBICIN AND CAMPTOTHECIN IN GRAPHENE FUNCIONALIZED WITH THE FOLIC ACID MOLECULE

### ABSTRACT

Graphene is a material that has been attracting more and more attention in the scientific world because it is a resistant, rigid, conductive and flexible material and when functionalized can be used as a nanocarrier for drugs.

We functionalized the Graphene sheet with the FA and calculated its adsorption energy, then added the functionalized sheet with two drugs: DOX and CPT and recalculated its energy, in order to discover the lowest adsorption energy. The energy of graphene sheet+FA resulted in -49,366 kcal/mol and the Graphene sheet+FA+DOX+CPT resulted in -105,240 kcal/mol and thus observed that the leaf energy when adding the drugs became stable.

### Keywords:

Carbon allotropes, Graphene, Doxorubicin, Camptothecin.