



E0337

ESTUDO CONFORMACIONAL DE OLIGÔMEROS DE MELANINA UTILIZANDO INTERFACES GRÁFICAS PARA O MOPAC (PROGRAMA CHEM2PAC)

Daniel Sarmiento Abrahão (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Douglas Soares Galvão (Orientador), Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW, UNICAMP

A síntese de melanina nos seres vivos e a própria melanina – sua estrutura e sua massa molar – são, apesar de tão estudadas, ainda questões não completamente compreendidas. Isso é devido, em parte, à sua natureza físico-química: altamente insolúvel, com massa molecular alta, e além disso, é difícil separá-la dos outros componentes celulares do tecido onde ela ocorre para se obter uma forma pura. A eumelanina – o mais importante subgrupo das melaninas – é caracterizada por ser marrom escura ou preta, é responsável pela coloração de pele e pêlos e está presente em quase todos os mamíferos. É nesse tipo de melanina que o projeto está focado. O processo teórico consiste em investigar modelos estruturais prováveis para a melanina (no caso, do tipo eumelanina), e confrontar com os dados experimentais disponíveis, como raios-x, por exemplo. Mas como são muitas as possibilidades de conformação, uma busca sistemática manual é praticamente impossível, e necessita-se de uma ferramenta para automatizar essas buscas. O programa Chem2Pac, que foi desenvolvido inicialmente por M. Cyrillo, para este fim, cria uma interface gráfica amigável ao programa MOPAC, e a outros programas úteis, e permite a criação e análise de conformeros. Por isso escolheu-se reescrever o programa, agora em C/C++ que é altamente portátil, para que, depois, fossem feitos os cálculos conformacionais.

Melanina - Busca conformacional - MOPAC