



E0318

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

Daniel Sarmento 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 bem estudadas, ainda questões não completamente compreendidas. Isso é devido 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. 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. Esse projeto visou dar continuidade ao projeto de mesmo nome, iniciado há um ano, que consiste em utilizar o processo teórico para investigar modelos estruturais prováveis para a melanina (no caso, do tipo eumelanina), e confrontar com os dados experimentais disponíveis, como raios-x, por exemplo. O programa Chem2Pac foi construído para facilitar essa busca, dando uma interface gráfica amigável a pacotes de cálculos quânticos, como o MOPAC e a outros programas úteis, tornando-se uma grande ferramenta de pesquisa. O programa foi finalizado, adicionado um arquivo de ajuda e foi preparada a divulgação – artigo e site.

Melanina - Busca conformacional - MOPAC