

# ESTUDO CONFORMACIONAL DE OLIGÔMEROS DE MELANINA UTILIZANDO INTERFACES GRÁFICAS PARA O MOPAC<sup>[1]</sup> (PROGRAMA CHEM2PAC)

INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN (UNICAMP)

Aluno: Daniel Sarmiento Abrahão - daniel.abrahao@gmail.com

Orientador: Douglas Soares Galvão (DFA - IFGW)

PIBIC/CNPq

Palavras-chave: Melanina - Busca Conformacional - MOPAC



## Introdução:

O processo de busca teórica proposta pelo projeto consiste em variar uma característica conformacional de uma molécula, como por exemplo um ângulo ou uma distância e calcular a energia de formação desse conformero característico. O conformero que tiver a menor energia de formação entre todos é, teoricamente, o mais provável.

Mas se quisermos procurar o valor de apenas um ângulo entre três átomos dentro de uma molécula, por exemplo, teríamos que calcular os valores de energia 360 vezes se variando um grau a cada cálculo. Se fosse adicionado mais um ângulo, esse valor subiria para quase 130 mil vezes. É um crescimento exponencial, que torna a tarefa trabalhosa e demorada.

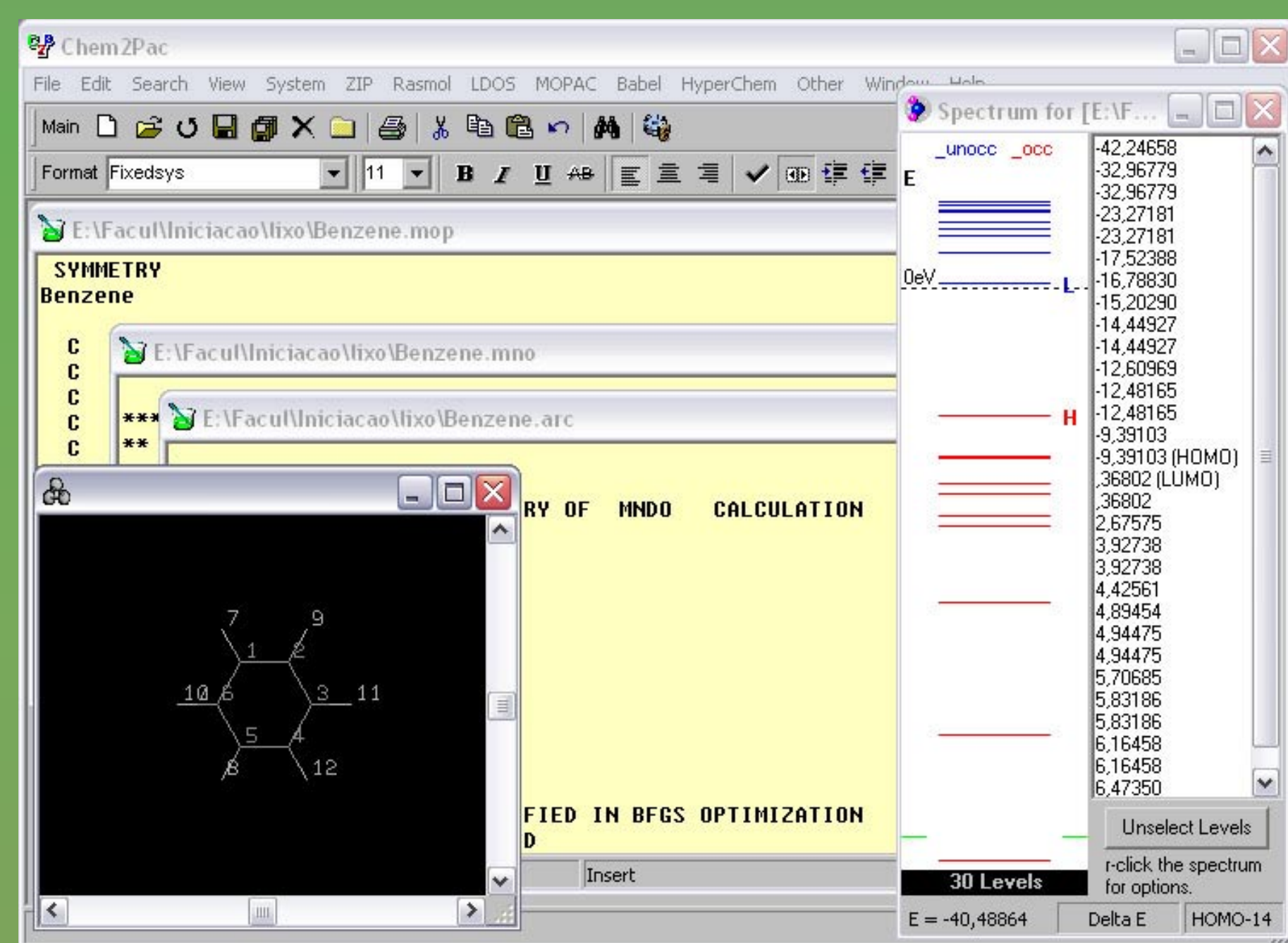


Fig3: O programa Chem2Pac rodando em Windows XP, após cálculo do MOPAC: organização dos dados.

Sem esforço 180 conformeros da hidroquinona foram criados e o calor de formação de cada um foi calculado. Esses valores foram dispostos em uma tabela, que facilmente pôde ser exportado - para um programa de planilhas com o Excel®, por exemplo.

A curva feita no exemplo (fig.8) mostra que a menor energia é próximo dos 120°

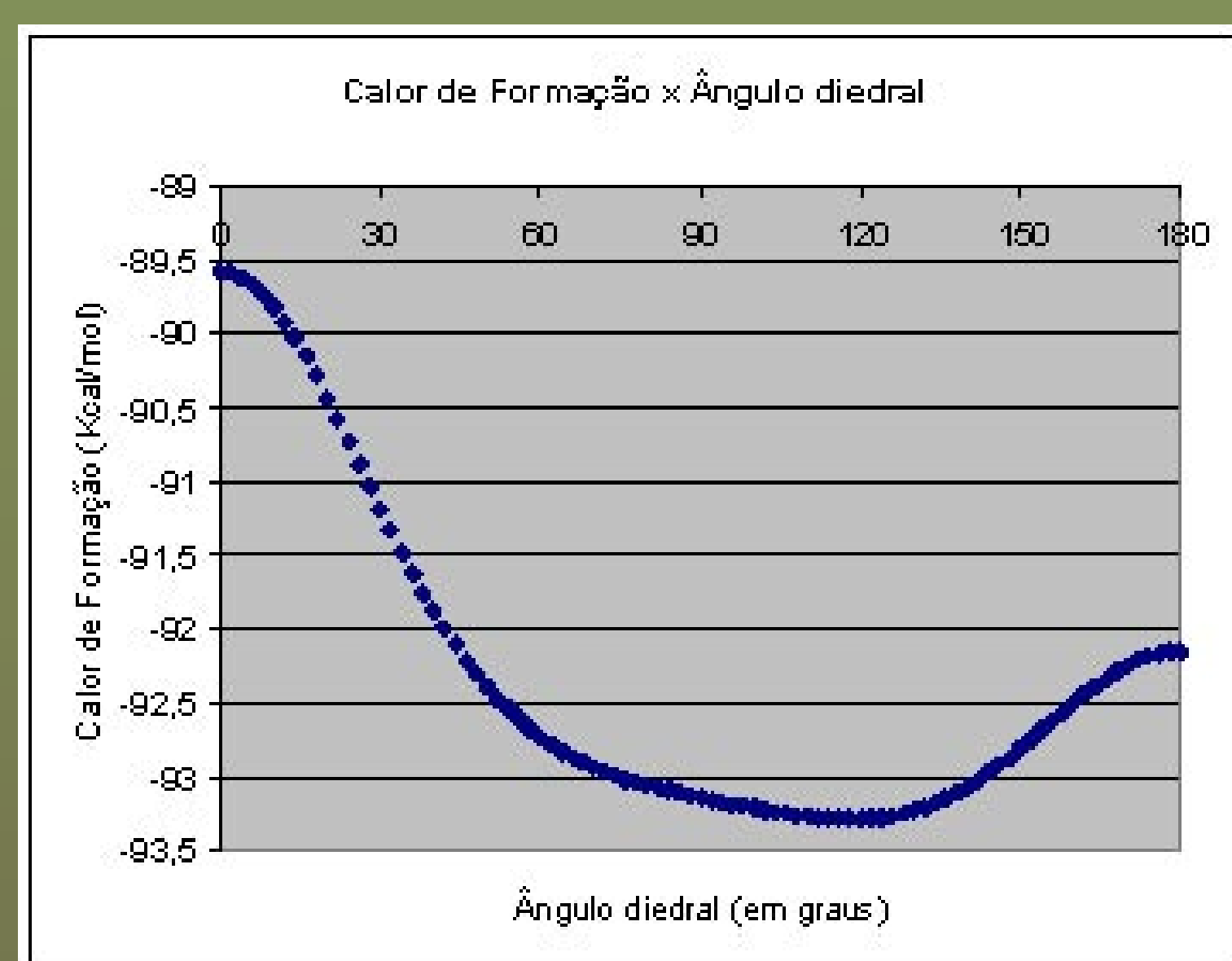


Fig8: Curva do calor de formação em relação ao ângulo diedral formado pelos dímeros, feito no Excel®.

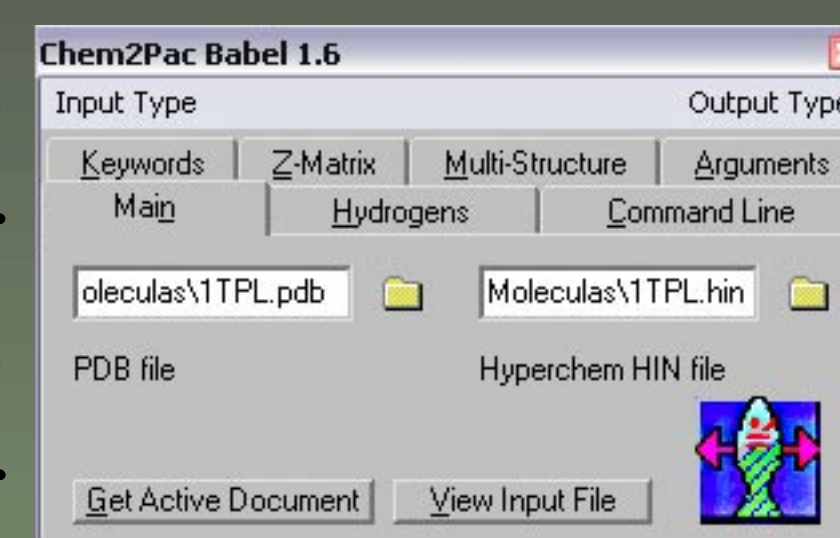


Fig4: Conversor de tipos de arquivos.

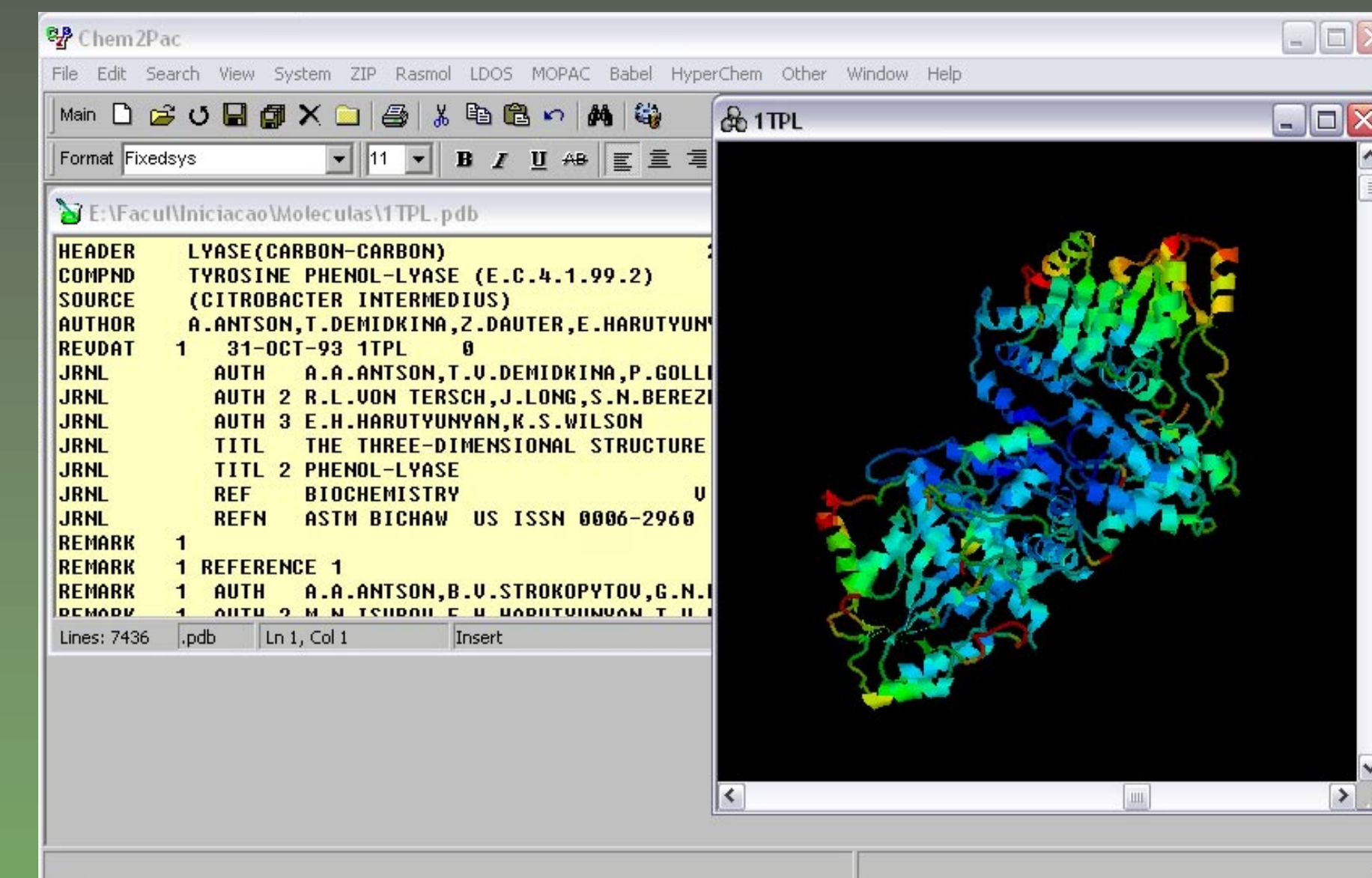


Fig1: O programa Chem2Pac rodando em Windows XP, sendo utilizado para visualização de molécula, através do programa RasMol<sup>[2]</sup>.

## Metodologia:

O programa Chem2Pac – programa desenvolvido no projeto – é um editor básico de texto, integrador de ferramentas úteis (rederizador/visualizador (fig.1), conversor de tipos de arquivos (fig.4), automatizadores (fig.3) e etc).

E sua principal função é criar várias possibilidades de conformeros (fig.2), calcular as energias de formação e disponibilizá-las de forma organizada e prática: gráficos e tabelas.

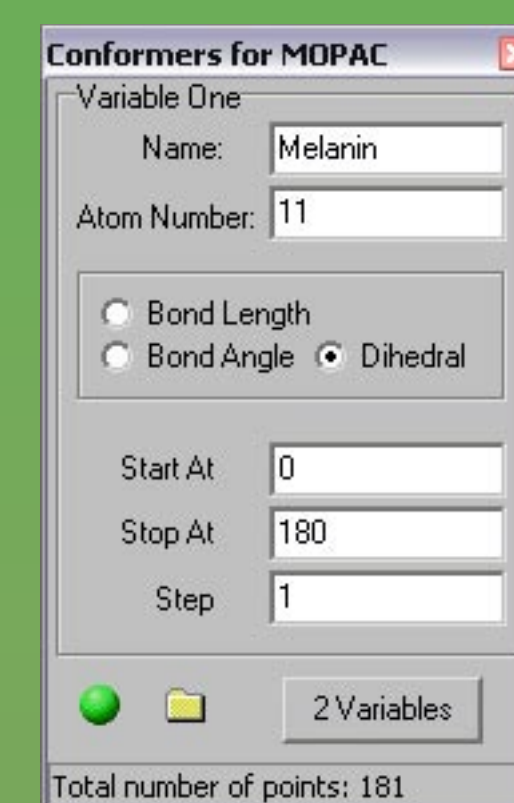


Fig2: A ferramenta de criação de conformeros.

A molécula utilizada no projeto, como teste foi um dímero de hidroquinona (fig.5).

Utilizando o próprio Chem2Pac, a molécula foi montada (fig.6) sob forma de input do programa MOPAC e otimizada com a ferramenta de conformeros (fig.7).

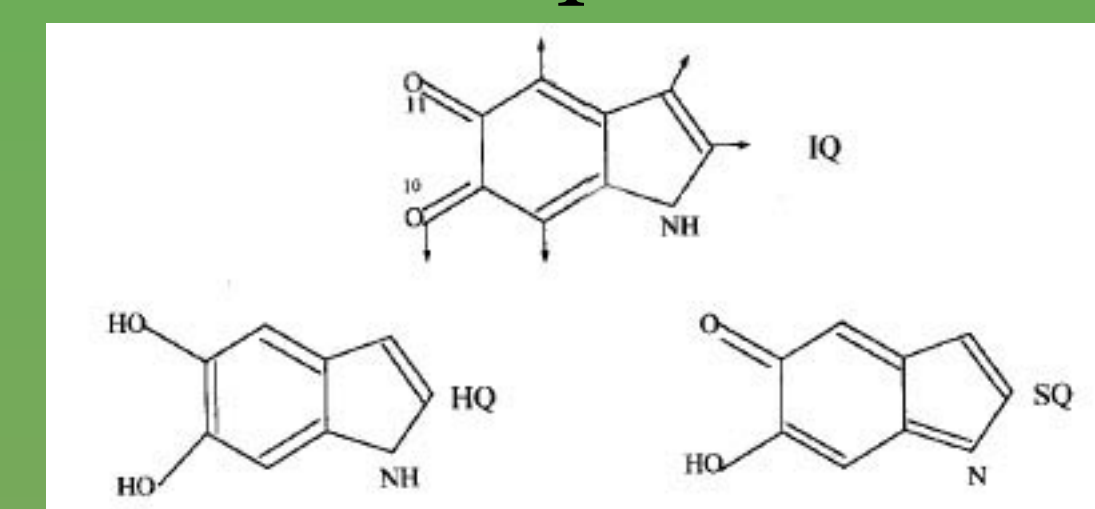


Fig5: Estruturas estudadas no projeto: 5,6-indolequinona (IQ) e suas formas reduzidas hidroquinona (HQ) e semiquinona (SQ).

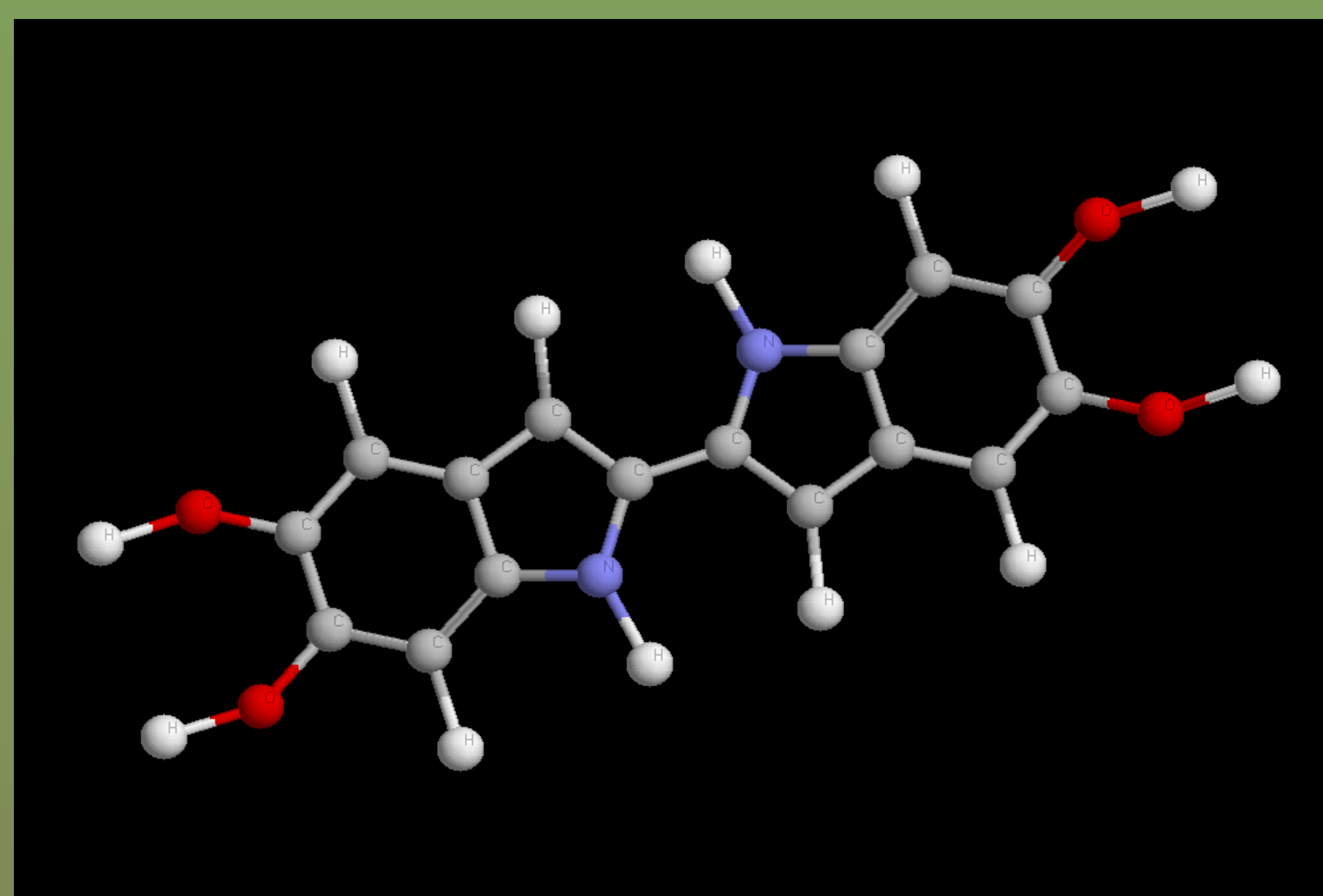


Fig6: Conformero da hidroquinona criado no Chem2Pac para a busca, antes das otimizações. Ângulo diedral a 180°.

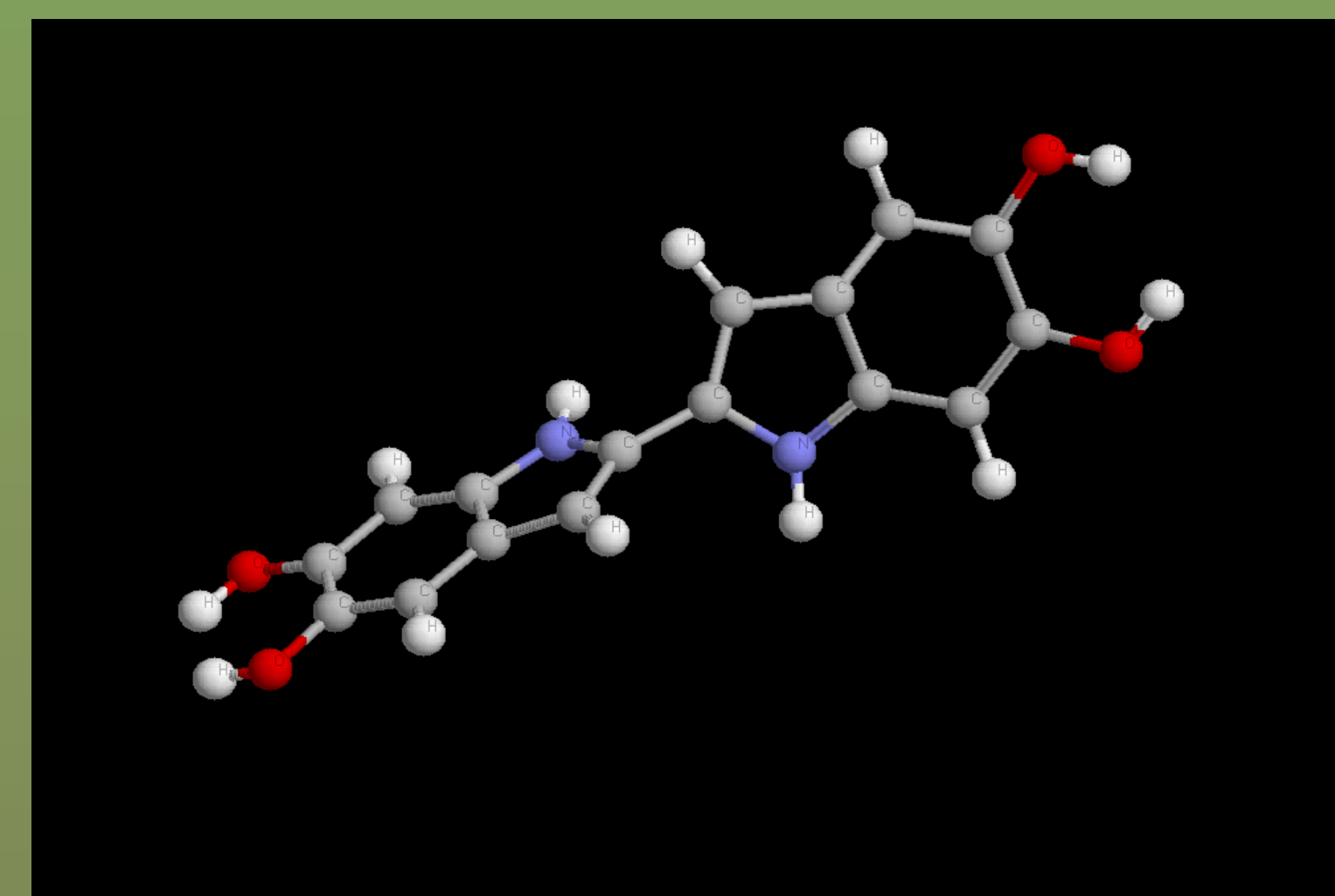


Fig7: Outra forma da hidroquinona gerada automaticamente pela ferramenta de conformeros e otimizada com o MOPAC. Diedral a ~118°.

## Conclusões:

O trabalho manual economizado pelos algoritmos do programa Chem2Pac responsáveis pela automatização da busca conformacional, torna o método teórico uma ferramenta de grande potencial nas pesquisas científicas.

## Bibliografia:

[1] J. J. P. Stewart, J. Comp. Chem. 10, 209 (1991). O MOPAC (Molecular Package) é um programa que contém diversos hamiltonianos semi-empíricos, utilizado geralmente para buscas conformacionais.

[2] RasMol And OpenRasmol - <http://www.openrasmol.org/>

[3] Melanins and Melanogenesis, Prota, G., Academic Press, New York, 1992.

