



XVI congresso interno de iniciação científica

Ginásio Multidisciplinar da Unicamp  
24 a 25 de setembro de 2008



E0402

**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 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. Esse projeto visou dar continuidade ao projeto de mesmo nome, iniciado há dois anos, que consiste em utilizar o processo teórico para investigar modelos estruturais para a melanina (no caso, do tipo eumelanina), e confrontar com os dados experimentais disponíveis, como raios-x, por exemplo. O projeto Chem2Pac, idealizado e executado por Marcio Cyrillo, tinha como objetivo fornecer um pacote de buscas conformacionais completo e de uso fácil e, até certo ponto, intuitivo e foi construído para facilitar essa busca, dando uma interface gráfica amigável a pacotes decálculos quânticos, como o MOPAC e a outros programas úteis, tornando-se uma poderosa ferramenta de pesquisa. Nesse projeto de iniciação científica o Chem2Pac foi reconstruído para remover incompatibilidades com os novos sistemas operacionais e foi adicionada documentação para suporte e utilizando o programa, foi feita uma busca conformacional teórica da eumelanina.

Melaninas - Simulação - MOPAC