

Programa Institucional de Bolsas  
de Iniciação Científica PIBIC

23 a 25  
outubro

Pró-Reitoria de Pesquisa - Pibic/CNPq  
Pró-Reitoria de Graduação - SAE/Unicamp



E0655

### **ESTUDO TEÓRICO DO MECANISMO DE OXIDAÇÃO DA LUCIFERINA CATALISADA POR LUCIFERASE**

Felipe Diego dos Santos Wieira (Bolsista SAE/UNICAMP e IC CNPq) e Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Neste trabalho, tem sido utilizada a Teoria do Funcional de Densidade (DFT) no estudo do mecanismo da reação de oxidação da luciferina catalisada pela enzima luciferase, uma oxireductase, tomando como modelo a enzima produzida pelo pirilampo japonês (*Luciola Cruciat*a). Concluiu-se que, para essa reação, o intermediário 1,2-dioxetano, altamente energético, é o responsável pela formação das espécies excitadas que compõem o equilíbrio ceto-enólico observado para a oxiluciferina ao fim da reação. Assim, motivado por trabalhos que descrevem emissões com diferentes cores para pirilampos em diferentes regiões do planeta, objetiva-se a compreensão do papel de tal enzima na estabilização dos estados excitados e, conseqüentemente, na cor da luz emitida. Para isto, tem sido feito estudos utilizando-se a Teoria do Funcional de Densidade Dependente do Tempo (TDDFT) aplicada aos estados excitados resultantes da decomposição da espécie 1,2-dioxetano. Até o presente momento, as estruturas das espécies envolvidas na reação não catalisada foram otimizadas e o mecanismo estabelecido, permitindo partir para a etapa de modelagem do sítio ativo da enzima e cálculos finais.

Luciferina - TDDFT - Modelagem molecular