

DESCRITORES QUÍMICO-QUÂNTICOS DE BASES NITROGENADAS UTILIZANDO TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE

Débora I. da S. Gomes¹ (PG), Carlos Eduardo de S. Teodoro¹ (PQ), Lilian Weitzel C. Paes^{1*} (PQ)

¹Universidade Federal Fluminense, EEIMVR, Volta Redonda/RJ, Brasil, PGTA, LabModMol.

e-mail: lilianweitzel@id.uff.br

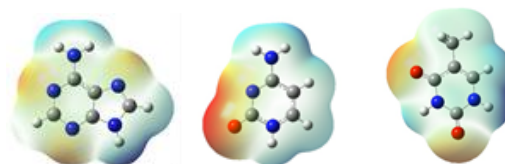
Palavras Chave: Adenina, citosina, timina, DFT, Parâmetros quânticos.

Introdução

O ácido desoxirribonucleico (DNA) em seu ambiente celular é propenso a uma ampla gama de vias de degradação envolvendo hidrólise e reações com vários produtos químicos e agentes físicos¹. Recentemente, grandes esforços foram realizados usando abordagens teóricas para obter mais informações sobre a reatividade química das bases². É sabido que algumas moléculas são mais estáveis e outras mais reativas. Também é frequentemente observado que algumas posições atômicas dentro de moléculas são mais propensas a reagir do que seus vizinhos. Os descritores globais baseados na teoria do funcional de densidade conectam os parâmetros eletrônicos à reatividade do sistema. Os descritores são definidos em termos de parâmetros químicos gerais como potencial de ionização (I), afinidade eletrônica (AE), eletronegatividade (χ), dureza (η), potencial químico (μ), índice de eletrofilicidade (ω) e descritores de reatividade local, como Função de Fukui. O estudo em questão tem como objetivo realizar cálculo da estrutura molecular e reatividade química das bases nitrogenadas adenina, citosina e timina. Todos os cálculos computacionais foram realizados usando o programa Gaussian 09W e UCA. O funcional híbrido B3LYP e a função de base 6-311G(d,p), foi utilizada para todos os cálculos em fase gás.

Resultados e Discussão

Os cálculos foram convergidos em uma à energia de mínimo, corroborados pela ausência de frequências imaginárias. Os parâmetros geométricos calculados apresentam em boa concordância com os encontrados experimentalmente³. A densidade total de elétrons mapeada com a superfície do potencial eletrostático molecular (MEP) foi plotada para todos os compostos conforme mostrado na Fig. 1. O MEP é uma propriedade útil para o estudo da reatividade, uma vez que um eletrófilo que se aproxima será atraído para regiões negativas (onde o efeito da distribuição de elétrons é dominante), estes resultados estão em concordância com os valores calculados dos índices de FUKUI f^+ e f^- .



Adenina Citosina Timina

Figura 1. Superfície de potencial eletrostático

Tabela 1. Parâmetros quânticos calculados (eV)

	Adenina	Citosina	Timina
I	6,3	6,4	6,9
HOMO	-6,3	-6,4	-6,9
AE	0,9	1,2	1,5
LUMO	-0,9	-1,2	-1,5
ΔE	5,4	5,2	5,5
η	2,7	2,6	2,7
χ	3,6	3,8	4,2
μ	-3,6	-3,8	-4,2
ω	2,4	2,8	3,3

O potencial químico μ mede a tendência de perder elétron, quando μ se torna mais negativo, é mais difícil perder um elétron. Conforme mostrado na Tabela 1, a adenina é a base com maior valor de μ sendo a mais reativa entre as bases. Eletrofilicidade fornece a informações de reatividade, e mostram se uma molécula é capaz de doação de elétron. Um bom nucleófilo é caracterizado por um valor mais baixo de ω . Os resultados apontam que a adenina apresenta um valor mais baixo de ω , de modo que o composto é bom nucleófilo.

Conclusões

Todos os cálculos apresentados neste trabalho demonstrou que os locais de interação das bases nucleicas podem ser previstos usando descritores de reatividade baseados no método DFT.

Agradecimentos

FAPERJ, UFF

¹ Lindahl T. Nature. 1993, 362, 709.

² Xifeng L.; Zhongli, C.; Michael D. S. J. Phys. Chem. A. 2002, 106, 81596.

³ Gary P. et al. Acta Cryst. 1996, D52, 57.