

Estudo computacional de Flavonóides em metanol através de cálculos seqüenciais híbridos Monte Carlo/Mecânica Quântica

Brenda B. Moreira*, Tarciso S. de Andrade Filho, Jordan Del Nero

Universidade Federal do Pará, Faculdade de Física

66075-110, Belém, PA

E-mail: brendafisica@gmail.com

RESUMO

Neste trabalho faremos uma simulação do espectro de absorção e a interação de algumas moléculas derivadas de Flavonóides em solução alcoólica. As estruturas moleculares investigadas foram: composto 1 (Kaempferol em metanol) e composto 2 (Quercetina em metanol).

Este estudo proporciona a possibilidade de modelagem de sistemas biológicos que são utilizados no combate aos radicais livres e doenças degenerativas como Mal de Alzheimer, Mal de Parkinson e Arteriosclerose.

A simulação foi feita através de passos Monte Carlo (MC) e a termalização por passos MC/Mecânica Quântica (MC/MQ) em procedimentos padrões da técnica Metrópolis, onde se adotou ensemble canônico NVT (número de moléculas, volume e temperatura constantes). O método computacional empregado para obtenção da geometria de estado fundamental foi o da Teoria do Funcional de Densidade (DFT) devido a seu refino na aproximação para a solução da equação de Schrödinger para muitos corpos, o que permite obter resultados mais confiáveis. O funcional híbrido B3LYP (Becke-Lee-Yang and Parr) foi associado à base dos orbitais moleculares gaussianos 6-311G, com duas funções difusas e polarização d e p. Ao integrar a Função de Distribuição Radial (RDF) esféricamente obtivemos quantas moléculas de metanol estão circundando uma molécula de soluto: 32 moléculas no sistema 1 e 38 moléculas no sistema 2.

Os cálculos quânticos, através do método

semi-empírico INDO/S-CI (Intermediate Neglect of Differential Overlap / Spectroscopy - Configuration Interaction), permitiram encontrar a média da primeira camada de solvatação de 351.1.2 nm no sistema 1 e 307.5.4 nm no sistema 2.

Os resultados obtidos mostram que o número das pontes de hidrogênio (PH) no sistema 2 (5 PH com 34.4% de ocorrência) foram maiores que no sistema 1 (2 PH com 53.6% de ocorrência) indicando, assim, uma melhor atividade antioxidante no sistema 2.

Referências

- [1] K. Coutinho et al., "Na efficient statistically converged average configuration for solvents effects", *Chemical Physics Letters*, 2007.
- [2] K. Coutinho, "Método Monte Carlo Aplicado à Simulação de Líquidos", Livro de Resumos da VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2000, pp.48-73.
- [3] K. Coutinho, S. Canuto, DICE: A Monte Carlo Program for Molecular Liquid Simulation, University of São Paulo, 1997.
- [4] M.C. Zerner, ZINDO: A semi-empirical program package, University of Florida, Gainesville, FL 32611, 1999.
- [5] M.J. Frisch et al., GAUSSIAN 98, Revision A.11.2, Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 1998.

*bolsista de Iniciação Científica PIBIC/CNPq