

ESTUDO MECÂNICO QUÂNTICO DA INTERAÇÃO ENTRE A MOLÉCULA CARMUSTINA E FRAGMENTOS DE DNA (APOIO UNIP)

Aluno: João Gabriel Teleschi

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Henrique Dias Marques Faria

Curso: Farmácia

Campus: Campinas Swift

O presente trabalho tem como objetivo investigar a capacidade de interação do DNA com o fármaco Carmustina pela análise de cargas de fluxo-zero dos sítios ativos e da análise NBO do ponto de vista Doador-Receptor. Todas as moléculas foram construídas no *software GAUSSVIEW5.0*. Já os cálculos de otimização geométrica e NBO foram realizados no programa *GAUSSIAN09*. Os cálculos de densidade eletrônica Laplaciano da densidade eletrônica e das cargas de *Bader* foram realizados pelos *softwares* MULTIWFN e AIMALL. Os resultados de transição eletrônica pela análise NBO demonstraram que ocorre intenso deslocamento intermolecular e intramolecular. As principais transições eletrônicas intermoleculares foram $BD(\sigma)O_6-C_{30}$ para $BD^*(\sigma)C_{16}-C_{18}$, $BD^*(\sigma)C_{19}-C_{18}$, $BD^*(\sigma)C_{19}-H_{23}$; $BD(\sigma)C_{29}-C_{30}$ para $BD^*(\sigma)C_{16}-C_{18}$, $BD^*(\sigma)C_{19}-H_{23}$ e $BD(\sigma)C_{29}-H_{33}$ para $BD^*(\sigma)C_{19}-H_{23}$. Esses resultados demonstram que esse deslocamento eletrônico deixa o C_{30} deficiente de elétrons, tornando-o um possível sítio ativo de reação. Esses resultados demonstram concordância e coerência quando comparados com os dados obtidos pela teoria QTAIM. A carga de fluxo-zero calculada foi de -1.93 u.a. para o C_{29} enquanto para o C_{30} foi de +0.34 u.a., evidenciando que o C_{30} é o sítio ativo de alquilação entre a base nitrogenada citosina e a base etanoguanina. O alto valor do Laplaciano de ρ (+4.18 u.a.) para esse átomo corrobora essa afirmação, mostrando que o mesmo é susceptível a um ataque nucleofílico.