

Química - BIC JÚNIOR

Análises computacionais de sistemas moleculares com aplicação farmacêutica e industrial.

Luan Henrique Santos - Bolsista Bic Júnior, Escola Estadual Firmino Costa.

Katia Júlia de Almeida - Orientadora DQI, UFLA. - Orientador(a)

Resumo

As investigações baseadas em metodologias de cálculos quânticos têm despertado interesse no desenvolvimento de novos fármacos e catalisadores com atividades otimizadas. Neste trabalho, diferentes moléculas foram investigadas, especificamente, o butano, ácido sulfúrico, glicose, benzeno, antraceno, levodopa, carbidopa, penicilamina, pentacloreto de fósforo, acetaminofeno e tiroxina. O objetivo deste estudo foi determinar as estruturas moleculares dessas moléculas e seus parâmetros de ligação otimizados, usando para isso o software Molden e programa Orca, implementados no sistema Linux, que tem acesso gratuito. O processo de otimização foi realizado usando cálculos baseados na teoria do funcional de densidade, com o funcional híbrido B3LYP, juntamente do conjunto de base atômico def2-SVP para todos os átomos. Esse conjunto de base são formados por funções matemáticas, que representam as densidades eletrônicas de cada átomo. Esse procedimento corresponde a primeira etapa na investigação de qualquer propriedade química e biológica dessas moléculas. Para a validação da metodologia empregada, os comprimentos e ângulos de ligação calculados foram comparados com os dados experimentais disponíveis na literatura. Essa comparação indicou uma variação média de 0,05 Angstrom () e 2 graus para os comprimentos e ângulos de ligação, respectivamente. Outro resultado importante obtido foi o cálculo do momento de dipolo de cada molécula, que mostrou um bom acordo com os valores experimentais encontrados na literatura. De modo geral, os resultados obtidos neste estudo indicam que a metodologia empregada apresenta boa performance na previsão teórica dessas moléculas, especialmente nos futuros cálculos envolvendo de suas propriedades químicas. As informações deste estudo podem ser usadas como guia de novos estudos experimentais, que apresentam dificuldades na interpretação e determinação de estruturas moleculares de difícil acesso, economizando, dessa maneira, tempo e recurso econômico.

Palavras-Chave: Cálculos quânticos, Otimização geométrica, Estruturas moleculares.

Instituição de Fomento: FAPEMIG

Link do pitch: <https://youtu.be/IAybKA4A9F0?si=skoVDMX4H7kB3pCO>