

Estudo da Interação do DNA com Íons e Fármacos

Arthur A. O. Rocha^a, V. Ludwig^a

a) Universidade Federal de Juiz de Fora, departamento de física

Resumo

A interação do DNA com estruturas e íons externos é muito importante para diversas áreas de pesquisa, a fim de entender melhor o comportamento dessas estruturas foi realizado um estudo utilizando um novo método computacional, o xTB(extended tight binding) e comparando-o com métodos já estabelecidos no meio. Para caracterizar melhor o comportamento das estruturas no modelo, realizamos cálculos para a caracterização da força sobre átomos, energia de ligação de hidrogênio e pôr fim a distância das ligações covalentes durante as otimizações de estrutura, comparando os resultados com outro método já conhecido, o DFT. Concluimos que as forças de interação nos átomos escolhidos se mantiveram coerente entre os dois métodos, já nas ligações covalentes observamos uma leve diferença entre as simulações no xTB e DFT, foram realizadas simulações em meios aquoso e gasoso usando um par de base Adenina-Timina, nesse mesmo par foram calculadas as energias de ligação de hidrogênio, onde constatamos que com base em valores experimentais já difundidos no meio, o método xTB se aproximou mais do resultado esperado. Concluimos que com os dados obtidos é possível expandir o trabalho para estruturas mais complexas e com interações com moléculas externas, visto que com o trabalho feito as propriedades físicas descritas são compatíveis e foram satisfatoriamente descritas.