



E0522

MODELAGEM MOLECULAR DE COMPOSTOS DE COORDENAÇÃO COM APLICAÇÃO BIOLÓGICA

Marcelle Bruna de Mendonca Spera, Pedro Paulo Corbi (Co-orientador) e Prof. Dr. André Luiz Barboza Formiga (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Possibilitando um planejamento racional dos fármacos, a modelagem molecular se faz muito importante para a Química, especialmente para a área de Química Medicinal. A fim de contribuir na busca de novos fármacos com menores efeitos colaterais e maiores efeitos benéficos, este trabalho apresenta o estudo teórico e a análise dos aminoácidos mimosina, aliina, desoxialiina e tiazolidina e de seus compostos com platina e paládio. Tais compostos são de grande interesse pois podem apresentar propriedades farmacológicas importantes como antimicrobianas e anticancerígenas. Usando o programa GAMESS e a Teoria do Funcional da Densidade foram calculadas as geometrias de equilíbrio e os espectros de infravermelho e RMN, com diversos conjuntos de base. A análise dos resultados foi comparada com resultados experimentais obtidos no próprio laboratório.

Modelagem molecular - Aminoácidos - Complexos