



E0746

### **CARACTERIZAÇÃO TEÓRICA DO MECANISMO DE DESAMINAÇÃO DE CITOSINA E GUANINA NA PRESENÇA DE N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**

Dênnys William Barbosa Martins (Bolsista ProFIS/CNPq) e Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O desenvolvimento da química teórica tem sido alcançado gradativamente nos últimos 100 anos, graças aos avanços de metodologias e tecnológicos. Este projeto é composto de duas partes principais: 1) Familiarização com os recursos computacionais e conhecimento de métodos e técnicas, e 2) Estudo do mecanismo experimental da "Desaminação de citosina e guanina em desoxinucleotídeos e oligonucleotídeos" usando-se métodos de estrutura eletrônica. Na primeira parte o aluno foi exposto ao formalismo teórico e a um contato preliminar com o sistema operacional FreeBSD (baseado em UNIX). Utilizou-se também algumas ferramentas computacionais como o programa de estrutura eletrônica (GAMESS), visualizador de moléculas (Molden) e editor de texto (LaTeX) que auxilia na produção de textos científicos. Cálculos teóricos preliminares foram efetuados na otimização de estruturas moleculares de sistemas simples. A etapa seguinte, em desenvolvimento, envolve, após este aprendizado inicial, o estudo teórico do mecanismo reacional da desaminação de citosina e guanina na presença de N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. A caracterização do mecanismo teórico será feita através de cálculos de Energias de ativação, Estado de Transição e Entalpia padrão de formação dos reagentes e produtos.

Desaminação - Citosina - N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>