

Dênnys William Barbosa Martins (Bolsista PIBIC/CNPq) e  
 Nelson Henrique Morgon (Orientador)  
 Instituto de Química – IQ, Unicamp  
 Departamento de Físico-Química Teórica

## Introdução:

As ferramentas computacionais disponíveis atualmente em química proporcionam um melhor entendimento qualitativo e quantitativo de muitos processos (ou mecanismos) reacionais. Neste trabalho estudamos o efeito de óxido nítrico ( $N_2O_3$ ), substância causadora de diversas patologias, pois afeta alguns processos biológicos importantes como: relaxamentos de vasos sanguíneos, inibição de agressão às plaquetas, neurotransmissão e mutação gênica<sup>1</sup>. No esquema da Figura 1 observamos o mecanismo da ação deste óxido na desaminação da citosina levando à formação de uracila proposto com base em evidências experimentais.

## Metodologia:

A verificação e identificação do mecanismo reacional (Figura 1), proposta no estudo de Jennifer *et al*<sup>1</sup>, tanto da reação espontânea, quanto induzida por óxido nítrico, foi feita caracterizando-se etapas importantes descritas no trabalho citado anteriormente. Para isso foram feitos cálculos teóricos de estrutura eletrônica usando-se método *ab initio Hartree Fock* (HF) com pseudopotencial (*effective core potential* – ECP)<sup>2</sup>. As estruturas iniciais foram obtidas com o programa de visualização MOLDEN<sup>3</sup>. As geometrias otimizadas e as correspondentes energias foram obtidas utilizando-se o programa GAMESS<sup>4</sup>.

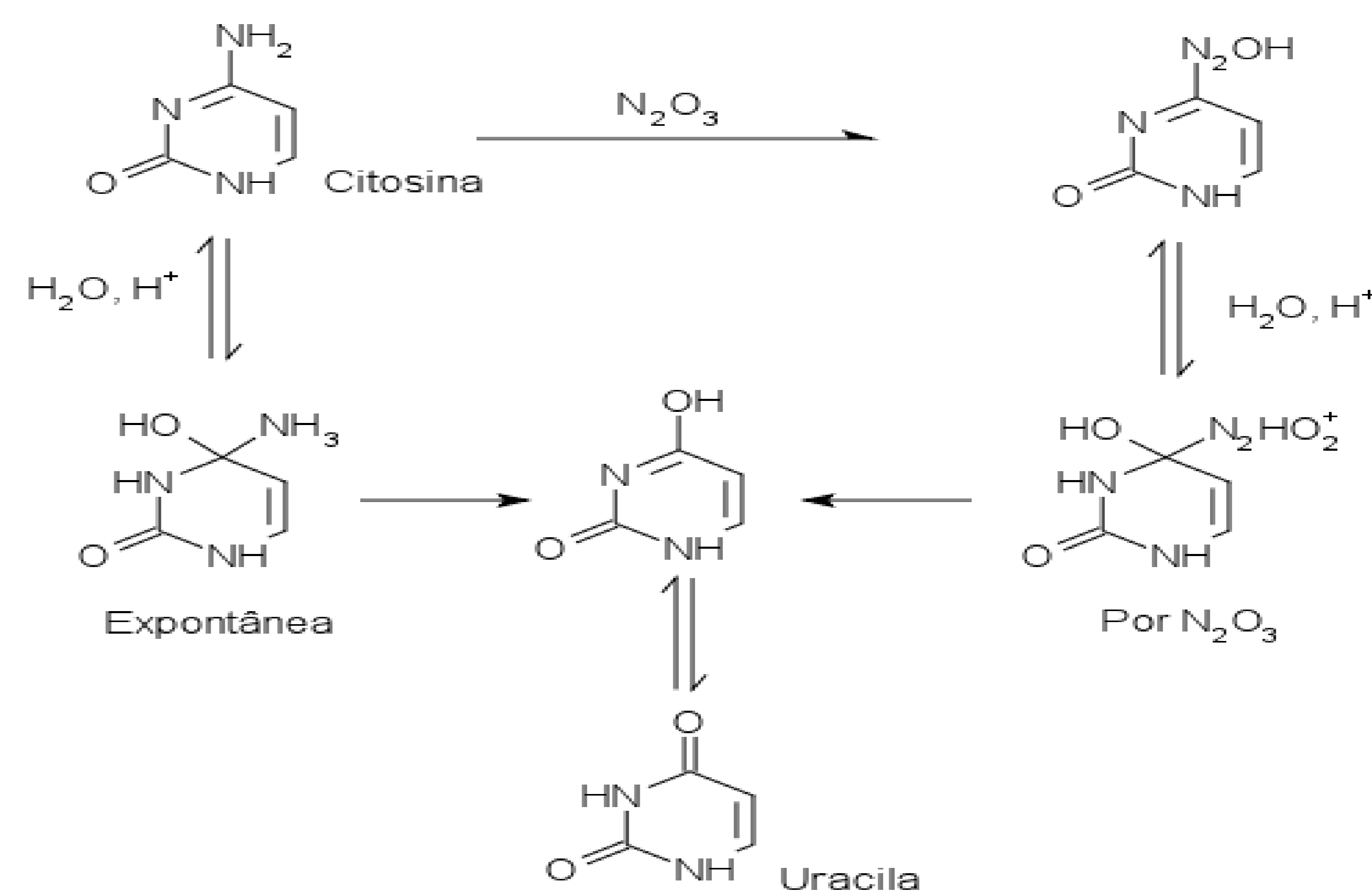


Figura 1 – Mecanismo de desaminação da Citosina

## Resultados:

Comparando-se os resultados calculados para as entalpias padrão de formação com aqueles presentes na base de dados experimentais do NIST<sup>4</sup> e do estudo experimental da Ref. [1], observa-se semelhanças qualitativas.

## Conclusões:

Nesta etapa preliminar do trabalho verificamos que os cálculos teóricos podem ser de grande valia na interpretação de resultados experimentais, validando a proposta de mecanismo sugerida para o processo da ação deste óxido na desaminação da citosina levando à formação de uracila. A caracterização dos estados de transição encontra-se em andamento.

## Referências:

- Jennifer L. Caufield, John S. Wishnok, and Steven R. Tannenbaum. **Nitric Oxide-induced Deamination of Cytosine and Guanine in Deoxynucleotides and Oligonucleotides**. *J. Biol. Chem* 1998 273: 12689-12695.
- MORGON, Nelson Henrique. **Computação em química teórica: informações técnicas**. *Quím. Nova*, São Paulo, v. 24, n. 5, Out. 2001.
- <http://www.cmbi.ru.nl/molden>
- <http://www.msg.ameslab.gov/games>
- <http://webbook.nist.gov/chemistry>