



CARACTERIZAÇÃO DE NANOBIMOLÉCULAS ADMINISTRADAS NO TRATAMENTO DE DOENÇAS NEURODEGENERATIVAS: UTILIZANDO MÉTODOS AB-INITIO

Johnyefeson de Oliveira Sousa¹, Nilton Ferreira Frazão²

RESUMO

A Doença de Huntington (DH) é uma moléstia neurodegenerativa, autossômica, genética e dominante causada por uma mutação no cromossomo quatro, no gene que codifica a proteína huntingtina (gene IT15). A mutação consiste em uma expansão polimórfica de trinucleotídeos CAG (citosina-adenina-guanina) no gene de Huntington. Os cálculos foram obtidos por meio do software Materials Studio. Foram realizados simulações em annealing molecular clássico para obter a melhor geometria molecular e as possíveis conformações da molécula de menor energia. Depois disso, foi utilizado o formalismo da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para apresentar os dados estruturais da molécula através do comprimento de ligação, ângulo de ligação e ângulo diedral de torção. As propriedades eletrônicas são apresentadas pela análise populacional de cargas, assim com, os orbitais moleculares de fronteira (HOMO e LUMO). A densidade eletrônica de estados foi calculada considerando-se a densidade total (DOS) e a densidade parcial (PDOS) para reforçar a descrição dos orbitais de fronteira. As propriedades ópticas são representadas pelas curvas de absorção óptica, que foi calculado considerando os funcionais LDA/PWC, GGA/PBE e GGA/BLYP. Todos esses cálculos foram realizados no programa DMol3.

Palavras-chave: Teoria do Funcional da Densidade, Doença de Huntington, Nanobiomoléculas.

CHARACTERIZATION OF NANOBIMOLECULE ADMINISTERED IN THE TREATMENT OF NEURODEGENERATIVE DISEASES: AB-INITIO METHODS

ABSTRACT

Huntington's Disease (HD) is a neurodegenerative disease, autosomal dominant genetic and caused by a mutation on chromosome four, the gene encoding the huntington protein (IT15 gene). The mutation consists of a polymorphic trinucleotide repeat expansion (adenine- cytosine-guanine) at the Huntington gene. The calculations were obtained through Materials Studio software. Annealing in Classical Molecular Simulations were performed to obtain the best molecular geometry and the possible conformations of the molecular lower-energy. Thereafter, it was used Functional Theory formalism density (DFT) to show structural details of the molecule through the bond length, bond angle and dihedral angle of twist. The electronic properties are presented by population analysis of charge, as well as, with the molecular orbital border (HOMO and LUMO). The electron density of states was calculated considering the total density (DOS) and the partial density (PDOS) to enhance the description of the frontier orbitals. The optical properties are represented by the curves of optical absorption, which was calculated assuming the functional LDA/PWC, GGA/GGA and PBE/BLYP. All these calculations were made in DMol3 program.

Keywords: Density Functional Theory, Huntington's Disease, Nanobiomolecules.

¹Aluno do Curso de Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFPG, Cuité, PB, e-mail: johnyefeson@gmail.com

²Licenciado em Física, Professor Doutor, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFPG, Cuité, PB, e-mail: nilton.frazao@ufcg.edu.br