

Abordagem CAMD para o Desenvolvimento de Novos Materiais

Ignéz Caracelli^{a,b} (ignez@fc.unesp.br) ,

Julio Zukerman-Schpector^b (julio@power.ufscar.br) & ***Milan Trsic***^c (milan@iqsc.usp.br)

^aLaCrEMM – Laboratório de Cristalografia, Esterodinâmica e Modelagem Molecular – UFSCar - São Carlos – SP

^bBiomat - Grupo de Física Teórica de Materiais e Biomoléculas – Dep. de Física – Faculdade de Ciências – Bauru – UNESP

^cGrupo de Química Quântica - Departamento de Química e Física Molecular - Instituto de Química de São Carlos - USP

O PROBLEMA

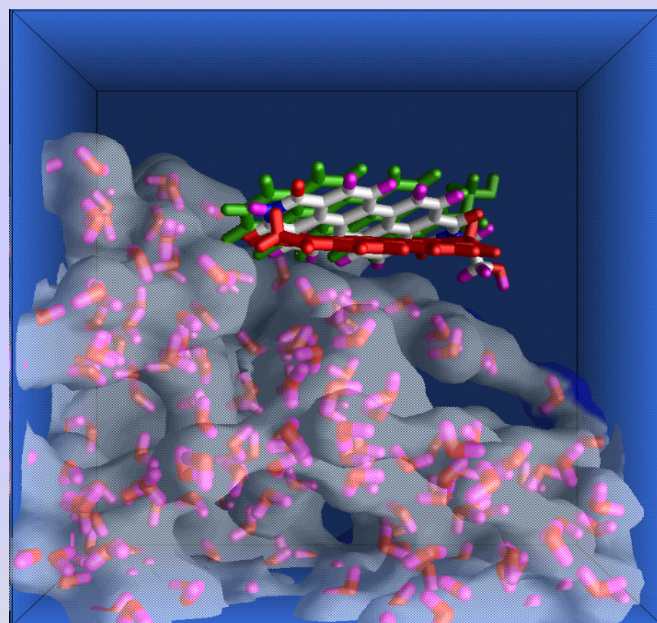
Moléculas orgânicas apresentam variedade de aplicações tecnológicas, como fotoreceptores e dispositivos eletroluminescentes. A aplicação de “computer-assisted molecular design” (CAMD) para o desenvolvimento de novos materiais poliméricos, biopolímeros e de novos fármacos tem sido bastante explorada.

A FÍSICA

O método de docking rígido foi projetado para o estudo da inserção de uma molécula de um fármaco ao sítio receptor de uma proteína^[1,2]. Entretanto, utilizando a mesma metodologia, foi possível propor uma nova aplicação: o estudo de moléculas orgânicas, que foram tratadas como se fossem o possível fármaco, depositadas sobre um filme.

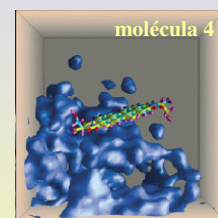
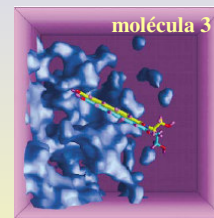
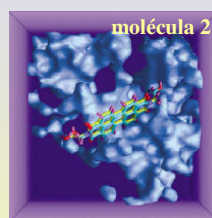
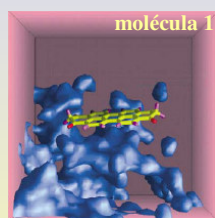
UMA APLICAÇÃO – Perilenos sobre uma Camada de Água

Determinou-se o arranjo espacial de uma molécula de perileno sobre uma camada de água^[3], bem como a de uma segunda molécula de perileno, igual à primeira, mas depositada sobre o conjunto camada de água + primeira molécula de perileno. Avaliou-se nesse caso, portanto a formação de camadas finas de moléculas orgânicas sobre uma superfície de água^[4, 5, 6]. As orientações das moléculas orgânicas sugerem emissão de excímero.

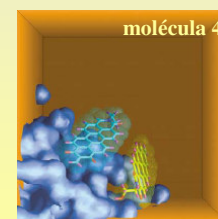
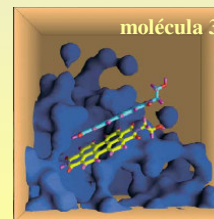
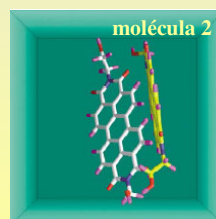
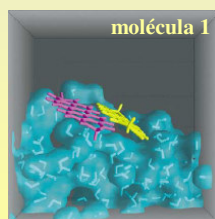


Referências

- [1] I.D. Kuntz, J.M. Blaney, S.J. Oatley, R. Landridge, T.E. Ferrin, J. Mol. Biol. 161 (1982) 269.
- [2] B.K. Shoichet, I.D. Kuntz, J. Mol. Biol. 221 (1991) 327.
- [3] L.C. Gomide Freitas, DIADORIM Program (Fortran code), Version2, DQ, UFSCar, 1996.
- [4] Oliveira, C. B., Caracelli, I. & Trsic, M. (2003). Materials Chemistry and Physics, 80, 457–460.
- [5] Oliveira, C. B., Trsic, M., Caracelli, I., Constantino, C. J. L., Antunes, P. A., Aroca, R. F. A XI SBQT, Caxambú - MG, 2001.
- [6] Oliveira, C.B., Caracelli, I., Trsic, M. X Simpósio Brasileiro de Química Teórica, Caxambú- MG, 1999.



Orientações dos perilenos com relação à camada de água



Orientações dos perilenos sobre a camada de água quando já havia uma molécula depositada

Agradecimentos:

CNPq

FAPESP