



XIX SBQT

Simpósio Brasileiro de Química Teórica 2017

12 a 17/Nov, 2017, Águas de Lindóia/SP, Brasil

Estados Excitados e Fotoquímica da Desoxirribose

Marcos Paulo de Oliveira, Clarissa Oliveira da Silva, Márcio Soares Pereira

*DEQUIM- Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, BR 465 km 07, Seropédica,
RJ, CEP: 23890-000.*

Abstract: A investigação da desoxirribose é de grande relevância, uma vez que essa molécula faz parte da composição da estrutura do DNA. O estudo computacional de carboidratos é uma maneira interessante de se entender o comportamento dessas moléculas frente a perturbações no estado fundamental. Apesar da grande quantidade de publicações de propriedades dos estados excitados de compostos orgânicos, ainda são poucos os estudos envolvendo carboidratos, o que dificulta a compreensão das suas propriedades fotoquímicas[1]. Para este trabalho foram selecionadas as quatro geometrias mais estáveis da desoxirribose[2] e analisadas suas energias de excitação, suas geometrias mais estáveis e possíveis caminhos de reação via interseção cônica. Neste estudo foi utilizado o método time-dependent density functional theory (TDDFT), e o método complete active space self-consistent field (CASSCF) para cálculos de otimização de geometria no estado excitado e interseção cônica. Os cálculos foram realizados com o software GAMESS[3]. Foram identificados dois possíveis canais de reação no estado excitado S1 a partir da região de Franck-Condon. O primeiro canal envolve a abertura do anel enquanto o segundo canal envolve o destacamento de um átomo de hidrogênio. Estão em curso investigações das conexões destes canais de reação com interseções cônicas entre o estado excitado S1 e o estado fundamental S0. Os dados obtidos ajudam a compreender as reações fotoquímicas e são de grande importância para o estudo dos carboidratos que formam a estrutura da hélice do DNA, e como ela pode ser afetada por radiação eletromagnética, o que pode sugerir mecanismos de sua deterioração envolvidos no câncer.

Key-words: Desoxirribose, Carboidratos, Fotoquímica, Estado Excitado

Support: CNPq

References:

- [1] TUNA, Deniz; SOBOLEWSKI, Andrzej L.; DOMCKE, Wolfgang. *Physical Chemistry Chemical Physics*, v. 16, n. 1, p. 38-47, 2014.
- [2] ALVES, Leandro Guilherme. *Automatizaçãodo processo de obtenção das conformações mais estáveis para pentoses por métodos ab initio. Dissertação (Mestrado) –ICE-UFRRJ Seropédica, 2014.*
- [3] "General Atomic and Molecular Electronic Structure System" M.W.Schmidt, K.K.Baldrige, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.H.Jensen, S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, J.A.Montgomery J. *Comput. Chem.*, 14, 1347-1363(1993).