

Modelagem molecular comparativa estrutural da cistina, selenocistina e teluriocistina

Cláudio de Lima Silva¹, Valter Aragão do Nascimento¹.

¹Pós-Graduação em Saúde e Desenvolvimento na Região Centro-Oeste, Faculdade de Medicina, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande, MS, Brasil.

A modelagem molecular utilizada na comparação estrutural da cistina, selenocistina e telurocistina propicia as informações detalhadas sobre os comprimentos e ângulos nas ligações atômicas. A investigação por intermédio do método semi-empírico, que mescla a teoria com os resultados experimentais, mostrou uma aproximação com os dados obtidos em laboratório a partir dos refinamentos da difração com raios-X da cistina que demonstra o alto poder preditivo dessa metodologia. Novas informações, incluindo os comprimentos e ângulos de uma ligação química, foram obtidas para os confôrmeros isolados da selenocistina e telurocistina, preenchendo uma lacuna na literatura nas características estruturais destes aminoácidos. Por meio da simulação computacional, pode-se demonstrar que as cadeias de carbono são, basicamente, as mesmas presentes na cistina, selenocistina e teluriocistina, e as porções que contêm os grupos funcionais são bastante semelhantes nestes aminoácidos. As distâncias C-S, C-Se e C-Te são 1.83 Å, 1.95 Å e 2.19 Å, respectivamente, ou seja, em conformidade com os raios iônicos dos calcogênios presentes. As distâncias para S-S, Se-Se e Te-Te estão de acordo com os dados de raios-X disponíveis na literatura. O Gaussian 09W, com o visualizador Gaussian View 5.0, propiciou as simulações computacionais por meio de algoritmos e métodos para determinar as propriedades de sistemas atômicos e moleculares. Os softwares proporcionaram os parâmetros geométricos dos compostos bioativos, a distribuição da densidade das cargas atômicas, potenciais eletrostáticos e os cálculos dos orbitais.

Palavras-chave: Modelagem Molecular; Raio-X; Ligações Anatômicas.