

Projeto de Pesquisa Pós-Doutorado

**Estudo Teórico de Nucleosídeos Lipofílicos em  
Solventes e em Monocamadas Lipídicas Utilizando  
Métodos Híbridos de Mecânica Quântica e  
Mecânica Molecular.**

**Cíntia C. Vequi-Suplicy**

Supervisora

**Kaline Coutinho**

**Departamento de Física Geral**

**Instituto de Física**

**Universidade de São Paulo**

**São Paulo, 17 de Maio de 2010**

## Resumo

Muitas aplicações biotecnológicas são baseadas em duas características principais de biomoléculas: a capacidade de auto-organização e as interações específicas. Existem hoje muitos estudos experimentais realizados numa nova classe de moléculas chamadas de nucleosídeo lipofílico, que têm a capacidade de se ancorarem em estruturas lipídicas auto-organizadas, como mono/bicamadas, e de capturarem bases nitrogenadas de fitas de DNA e RNA, devido às fortes interações específicas. Portanto, devido a essas características, elas podem ser utilizadas numa ampla variedade de aplicações. Essas moléculas são compostas por um nucleosídeo (responsável pelas interações específicas) e uma cauda hidrocarbônica (responsável pelo ancoramento). Embora existam diversos estudos experimentais realizados nesses sistemas para tentar compreender as interações e identificar formas de melhorar suas aplicações biotecnológicas, até o momento, não foi realizado nenhum estudo teórico. Portanto, neste projeto estudaremos, com métodos teóricos de mecânica quântica e mecânica molecular, as propriedades estruturais (como flexibilidade das moléculas e posição do ancoramento) e propriedades eletrônicas (como espectros eletrônicos e vibracionais e deslocamentos magnéticos) de dois isômeros do nucleosídeo lipofílico palmitoiluridina interagindo com uma base nitrogenada complementar (adenina) em meio solvente (clorofórmio), interface (ar-água) e monocamada lipídica (dipalmitoilfosfatidilcolina). Desta forma, pretendemos compreender melhor as interações moleculares dominantes e os efeitos do meio nas propriedades moleculares, para podermos auxiliar na interpretação de resultados experimentais e nas propostas de novos caminhos para melhorar as aplicações biotecnológicas desses sistemas.