

---

# Resumo Expandido

## INVESTIGAÇÃO TEÓRICA DE FOTOPRODUTOS GERADOS A PARTIR DA INTERAÇÃO ENTRE RADIAÇÃO UV-C COM MOLÉCULAS BIOLÓGICAS

**Sara da Costa Barbosa (aluna do Curso de Licenciatura em Física; Centro de Ciências Integradas; Universidade Federal do Tocantins; e-mail: [sara.barbosa@ufnt.edu.br](mailto:sara.barbosa@ufnt.edu.br)), Regina Lélis de Sousa (Professora do Curso de Licenciatura em Física; Centro de Ciências Integradas; Universidade Federal do Tocantins; e-mail: [regina.sousa@ufnt.edu.br](mailto:regina.sousa@ufnt.edu.br))**



## SUMÁRIO

I.	APRESENTAÇÃO E JUSTIFICATIVA	5
II.	OBJETIVOS	5
III.	METODOLOGIA	6
IV.	RESULTADOS	6
V.	AGRADECIMENTO À SUA RESPECTIVA AGÊNCIA DE FOMENTO (CNPq, FAPTO ou UFNT)	6
VI.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	6

# I. Apresentação e Justificativa

Conhecido por causar o COVID-19 e provocar uma longa pandemia em todo o mundo iniciada no final do ano de 2019, o SARS-COV-2 é um patógeno viral responsabilizado por deslanchar uma síndrome respiratória aguda e grave. Devido a isso, houve a necessidade de usar agentes de descontaminação patogênica e para isso, desde 1877 a radiação eletromagnética de alta frequência, especificamente a ultravioleta, vem sendo usada para a descontaminação e como agente de saneamento e purificação (KOWASLKI, 2009; BUONANNO, 2017; BUONANNO, 2020). A radiação UV-C é utilizada pois possui a capacidade de provocar alterações nos ácidos nucleicos do vírus, modificando sua estrutura molecular por meio de processos de espalhamento e absorção de fótons da radiação emitida e as moléculas que constituem cadeias de DNA (ou ADN - Ácido Desoxirribonucléico) ou RNA (ou ARN - Ácido Ribonucleico), tornando o microrganismo incapaz de se reproduzir (BOLTON, 2008). Dito isto, esse projeto compreende que a totalidade dos processos de dimerização causada pela radiação não são completamente compreendidos e a importância dos estudos de cunho teórico aliados aos procedimentos de investigações experimentais. Por isso, pretende-se compreender as modificações estruturais e eletrônicas decorrentes da dimerização das bases nitrogenadas que comportam o ADN e o ARN, e que também comporta a parcela de um projeto maior que objetiva investigar os caminhos de reação que induzem os processos de dimerização que serão analisados por meio de teorias e técnicas tradicionais de Física do Estado Sólido e da Biofísica com auxílio de ferramentas computacionais.

## II. Objetivos

Tem-se como objetivo geral investigar, por meio de simulações computacionais, os processos de dimerização de bases nitrogenadas tipo pirimidina (uracila, citosina e timina) pertencentes às moléculas biológicas de ADN e ARN, bem como as suas mudanças estruturais e eletrônicas, a fim de compreender melhor os efeitos da radiação UV-C sobre essas macromoléculas.

Os objetivos específicos são:

- Analisar as propriedades estruturais e energéticas associadas à formação de dímeros de pirimidina (uracila, citosina e timina) nas cadeias de ADN e ARN bem como estudar as alterações conformacionais das bases nitrogenadas resultantes da exposição à radiação UV-C.

- Investigar os caminhos de reação que levam à dimerização de pirimidinas em condições distintas de radiação e ambiente. O objetivo é mapear os possíveis estados de transição e barreiras de energia envolvidos nesses processos.
- Realizar simulações computacionais para prever as mudanças eletrônicas e de energia de ligação das bases nitrogenadas durante o processo de dimerização, utilizando métodos de Física do Estado Sólido para explorar esses fenômenos em nível quântico e molecular.
- Correlacionar os resultados teóricos com dados experimentais disponíveis, buscando validar modelos preditivos para a dimerização das bases nitrogenadas.
- Tendo por base as descrições das propriedades estruturais, energéticas, eletrônicas e reativas dos dímeros, propor melhorias em técnicas de descontaminação por UV-C.
- Em futuro próximo, pretende-se ainda caracterizar as propriedades estruturais, energéticas e os mecanismos associados à formação de pirimidinas hidratadas e os processos de desidratação subsequente e estudar o papel da água nas interações intermoleculares e como ela influencia a dimerização.

### III. Metodologia

Foi utilizado o pacote computacional de domínio público Quantum-Espresso (com pseudopotenciais "ultrasuaves" e funções de base do tipo ondas planas) para a solução da equação de Schrödinger, empregando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT (Giannozzi, 2009; GIANNOZZI, 2017)). O funcional de troca e correlação PBE (GGA - Generalized Gradient Approximation - parametrizado por Perdew, Burke e Ernzerhof) foi adotado para a obtenção de todos os resultados (Perdew, 1996). As relaxações estruturais seguiram o critério de convergência de força de  $1,0 \times 10^{-3}$ . Extensos testes de convergência indicaram que 40,0 Ry é um valor adequado para a energia de corte das ondas planas utilizadas como funções de base. Considerando que o estudo envolveu sistemas moleculares, todas as células unitárias usadas nas simulações eram ortorrômbicas, garantindo que a distância entre as imagens periódicas fosse maior ou igual a 15 Å. Além disso, softwares de visualização e plotagem, como Jmol, Xcrysden, Povray e Xmgrace, foram empregados para gerar as imagens.

### IV. Resultado

Serão discutidos os resultados de cálculos de propriedades estruturais e eletrônicas das bases nitrogenadas que compõem o RNA e o DNA bem como dímeros de

timina e uracila, que são estruturas que podem resultar dos processos de interação entre a radiação UV-C e o material biológico. O que se denomina de reagentes são estruturas resultantes da aproximação dos pares de bases nitrogenadas, podendo ser por exemplo um par de Timina-Timina ou Uracila-Uracila (KOWALSKI, 2009; GONZÁLEZ-RAMÍREZ, 2011; CLIMENT, 2010). Os resultados evidenciam que não há alterações significativas na estrutura ou nas propriedades eletrônicas quando comparadas com as bases isoladas. Já o que se denomina de produtos 1 e 2 são dímeros cujas configurações aconteceram de modo que formou-se uma ligação entre os carbonos dos anéis das bases pirimidinas como mostrado nas figuras 1 e 2, as quais apresentam duas configurações, o reagente das bases de timina e uracila e também o produto 2 das mesmas molécula.

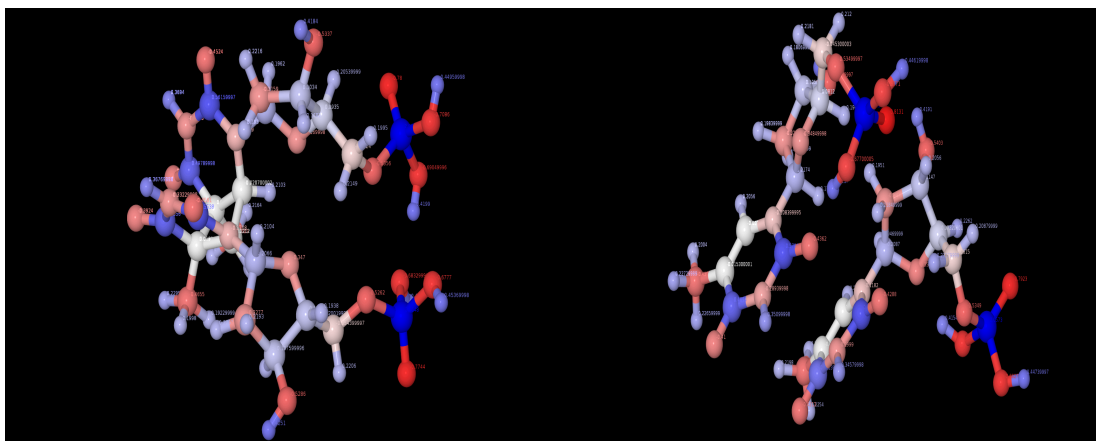


Figura 1: Dímeros de timina produto 2 e reagente, respectivamente. Os átomos são coloridos de acordo com suas cargas, os carregados negativamente tem cores mais claras e o positivamente cores mais fortes. A cor azul está associada a carga positiva enquanto o vermelho e suas gradações se associam às cargas negativas.

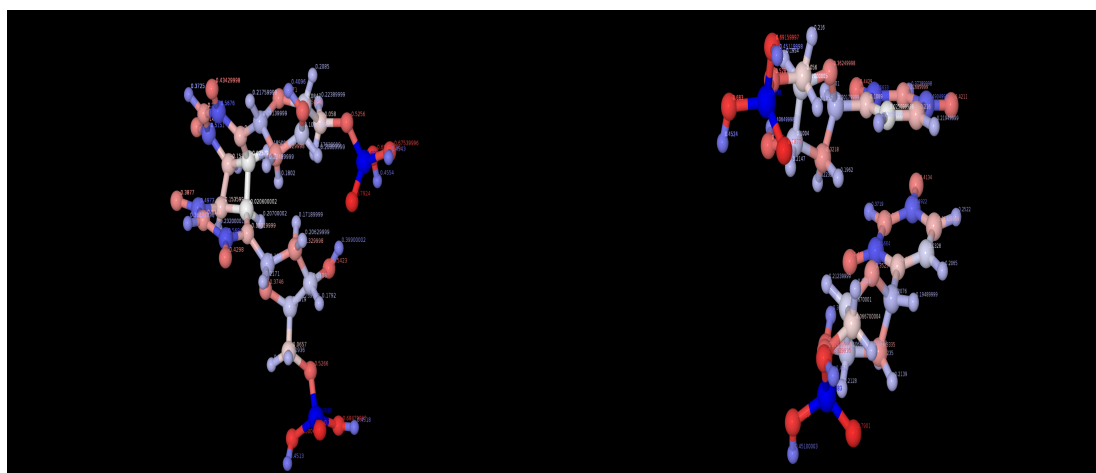


Figura 2: Dímeros de Uracila produto 2 e reagente respectivamente. Os átomos são coloridos de acordo com suas cargas, os carregados negativamente tem cores mais claras e o positivamente cores mais fortes. A cor azul está associada a carga positiva enquanto o vermelho e suas gradações se associam às

cargas negativas. Os dímeros de uracila não possuem um grupo de CH<sub>3</sub> ligados ao anel de carbono pertencente à base nitrogenada.

Na figura 1, na qual se apresenta as conformações designadas por reagente e produto para a Timina, evidencia-se a formação das ligações de carbono. Já na figura 2, temos os mesmo reagente e produto para a molécula de uracila, e o leitor observará que a singela diferença entre ambos que pode ser vista principalmente nos gráficos das PDOS (Projected Density of States) que serão apresentados a seguir.

A distribuição de cargas no anel da timina e da uracila apresenta diferenças, uma vez que o grupo CH<sub>3</sub> presente na timina altera essa distribuição (nas figuras 1 e 2, isso é evidenciado pelas mudanças nas cores dos átomos de carbono do anel da base nitrogenada). As demais características permanecem inalteradas quando se compara a distribuição de cargas entre base isolada e nucleotídeo, tanto na conformação de "reagente" quanto na de "produto". Não foram observadas alterações drásticas na distribuição de cargas durante a formação das ligações entre as bases nitrogenadas, resultando no produto final. Nas PDOS calculadas, como mostrado na figura 3, algumas mudanças são perceptíveis na contribuição do grupo fosfato, que faz parte do backbone, ao comparar as PDOS do reagente e do produto.

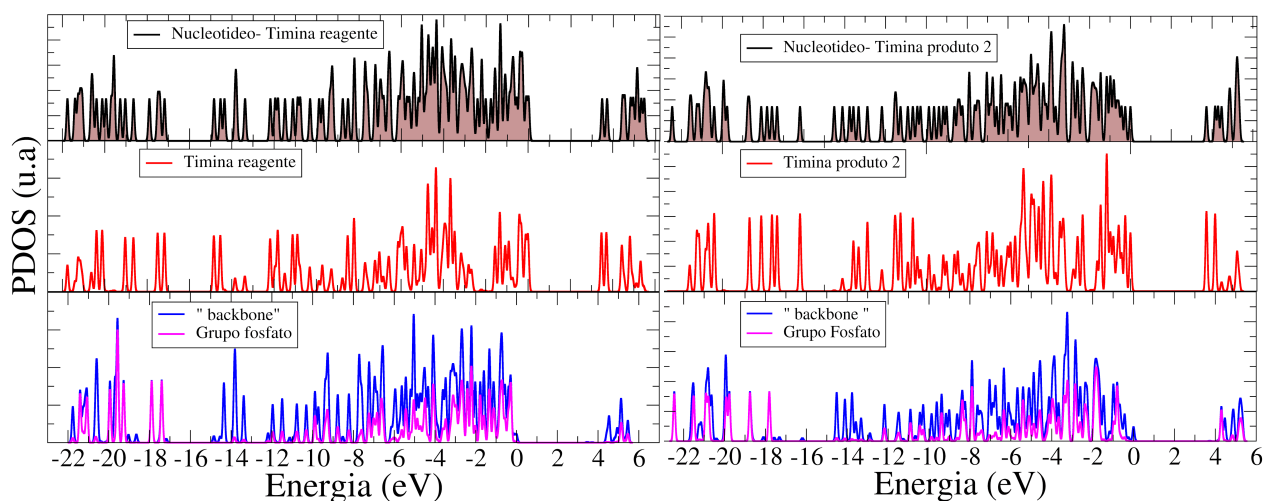


Figura 3: Projeção de densidade de estados (PDOS) dos nucleotídeos de Timina nas conformações designadas por reagente e produto 2, respectivamente.

A PDOS obtida para as conformações de reagente e produto da uracila é semelhante à da timina, e por isso não foi incluída devido à limitação de espaço. Em relação à PDOS apresentada na Figura 3, foi observado que, no topo da banda de valência das estruturas do produto 2, tanto para a timina quanto para a uracila, há uma contribuição do backbone. No entanto, essa contribuição não se origina do grupo fosfato. Já na conformação de reagente, nota-se uma contribuição do grupo fosfato no topo da banda de valência. Em outras palavras, a contribuição do grupo



fosfato se desloca para estados eletrônicos mais internos quando as ligações entre as bases de timina ou uracila são formadas.

## V. Agradecimentos à sua respectiva agência de fomento (CNPq, FAPT ou UFNT)

Gostaria de agradecer ao CNPQ por proporcionar subsídios financeiros para que este projeto pudesse ser desenvolvido, sendo de suma importância esse incentivo para que a aluna de iniciação científica pudesse dedicar-se tranquilamente às atividades de pesquisa.

## VI. Referências Bibliográficas

BOLTON, J. R.; COTTON, C. A. Ultraviolet disinfection handbook. AMERICAN WATER WORKS ASSOCIATION., 2009.

BUONANNO, M. et al. Germicidal efficacy and mammalian skin safety of 222- nm uv light. RADIATION RESEARCH, v. 187, n. 4, p. 493–501, 2017.

BUONANNO, M. et al. Far -uvc light efficiently and safely inactivates airborne human coronaviruses. NATURE RESEARCH – UNDER REVIEW, 2020.

CLIMENT, T. et al. Cyclobutane pyrimidine photodimerization of dna/rna nucleobases in the triplet state. J. PHYS. CHEM. LETT, v. 1, p. 2072–2076, 2010.

GIANNOZZI, P. et al. Advanced capabilities for materials modeling with quantum espresso. JOURNAL OF PHYSICS : CONDENSED MATTER, v. 29, p. 465901, 2017.

GIANNOZZI, P. et al. Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. Journal of Physics: Condensed Matter, v. 21, n. 39, p. 395502, 2009.

GONZÁLEZ-RAMÍREZ, I. et al. On the photoproduction of dna/rna cyclobutane pyrimidine dimers. Theor Chem Acc, n. 128, p. 705–711, 2011.

KOWALSKI, W. Ultraviolet germicidal irradiation handbook : Uvgi for air and surface disinfection. NEW YORK, 2009.