

MODELAGEM QUÂNTICA COMPUTACIONAL DE INTERAÇÃO ENTRE ANTIMATÉRIA E MOLÉCULAS DE CARACTERÍSTICAS BIOLÓGICAS

Ana Clara Ferreira Palmeira¹, Cristina Porto Gonçalves², Simara Santos Campos³

RESUMO

O uso de métodos computacionais para estudar a Física vem crescendo, e hoje se pode analisar interações entre anti partículas e partículas a partir de suas estruturas, como por exemplo o pósitron ligado a moléculas de características biológicas. Este tipo de aplicação possibilita o desenvolvimento de áreas tecnológicas e médicas, por isso este trabalho teve como objetivo construir a modelagem estrutural da Glicose, e da Cisteína e suas interações com o pósitron. Para cálculos estruturais é usada a FNMC (Finite Nuclear Mass Correction) criada por Gonçalves e colaboradores, pois ela lida com alterações isotópicas, corrige as Superfícies de Energia Potencial e funções de ondas eletrônicas, além dos métodos incluídos na construção dos códigos como MP2 e Hartree-Fock. A motivação para este trabalho tem o propósito de conciliar diferentes áreas da física, e dentre as aplicações têm-se a Física Médica, que juntamente com os exames de imagens computadorizada o PET-CT (Positron Emission Tomography-Computerized) permite analisar funções metabólicas de anatomia estrutural simultaneamente, uma combinação que tem auxiliado a indicar e até mesmo alterar procedimentos em pacientes com tumores de diversos tipos.

PALAVRAS-CHAVE: Complexo de pósitron, Física Atômica, geometria de relaxação modelagem.

COMPUTATIONAL QUANTUM MODELING OF THE INTERACTION BETWEEN ANTIMATTER AND MOLECULES WITH BIOLOGICAL CHARACTERISTICS

ABSTRACT

The use of computational methods to study Physics has been growing, and today it is possible to analyze interactions between antiparticles and particles based on their structures, such as the positron bound to molecules with biological characteristics. This type of application enables the development of technological and medical fields. Therefore, this work aimed to build the structural modeling of Glucose and Cysteine and their interactions with the positron. For structural calculations, the FNMC (Finite Nuclear Mass Correction), developed by Gonçalves and collaborators, was used, as it deals with isotopic changes, corrects Potential Energy Surfaces and electronic wave functions, in addition to the methods included in the construction of the codes such as MP2 and Hartree-Fock. The motivation for this work lies in reconciling different areas of physics, and among the applications is Medical Physics, which, together with computer-based imaging exams such as PET-CT (Positron Emission Tomography-Computed

¹ Estudante de graduação em Física na UESB.

² Professora Dr^a., Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas- UESB

³ Professora Dr^a., Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas- UESB

Tomography), allows for the simultaneous analysis of metabolic functions and structural anatomy. This combination has helped to guide and even modify procedures in patients with tumors of various types.

KEYWORDS: Atomic physics, positron complex, modeling, relaxation geometry.

INTRODUÇÃO

Ao longo da última década, vem crescendo os avanços na metodologia química envolvendo o pósitron. Seguindo a definição de antipartícula, o pósitron possui os mesmos números quânticos do elétron, porém com os sinais dos números quânticos aditivos opostos. É isso o que faz com que a matéria se aniquile com a antimatéria.

A construção dos complexos de pósitron torna possível analisar diversas propriedades dos sistemas escolhidos, como momento de dipolo, energia total do sistema, e relaxação geométrica. Nesse contexto, a pesquisa busca criar as modelagens de complexos de pósitron com características biológicas, destacando a sua relevância para a área da Física Atômica e Molecular e suas aplicações envolvendo a área da saúde e biológica. Este estudo pretende contribuir para uma melhor compreensão dos temas abordados envolvendo fundamentos físicos e químicos.

MATERIAIS E MÉTODOS

Este trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Física Teórica e Computacional da UESB (Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia), onde foram feitas as simulações dos sistemas físicos utilizando o pacote computacional GAMESS (*General Atomic and Molecular Electronic Structure System*) com a modificação do pacote *Isotope* desenvolvida pela Professora e Co-Autora deste trabalho: Cristina Gonçalves com a abordagem denominada Correção de Massa Nuclear Finita (FNMC), do inglês, *Finite Nuclear Mass Correction*. A FNMC pode ser aplicada em métodos de cálculo molecular que utilizam Combinação Linear de Orbitais Atômicos (LCAO).

O Hamiltoniano completo, no sistema de coordenadas do centro de massa dos núcleos para este sistema é:

$$H = -\frac{1}{2\mu_{AB}}\nabla_R^2 - \frac{\nabla_R^2}{2M} + H_{BO},$$

Os orbitais são otimizados de forma a minimizar a energia adiabática, a função de onda possui “assinatura” isotópica. Então o Hamiltoniano modelo tem a seguinte forma:

$$H_{mol} = \sum_A^m \left(-\sum_i^n \frac{\nabla_i^2}{2M_A} \delta_{AB} \right) - \sum_i^n \frac{\nabla_i^2}{2} + V_{mol}$$

Nesta metodologia o pósitron é tratado como um núcleo leve, tendo o seu movimento completamente separado do movimento dos elétrons do sistema. A base escolhida para os cálculos eletrônicos foi a 6-311+G, e foram utilizados métodos computacionais como MP2 (*Moller-Plesset*) e Hartree-Fock.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

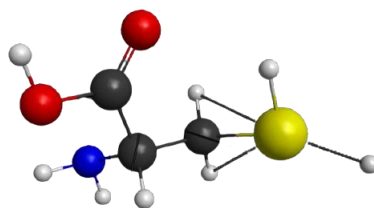
O primeiro passo é encontrar a geometria de equilíbrio de cada sistema, para isso faz-se duas modelagens de cada molécula, o sistema em sua forma “natural” sem a presença de fatores externos, e em contato com o pósitron, a partir dessa interação cria-se as modelagens. Uma das propriedades mais analisadas neste estudo que está diretamente ligada à geometria, é a relaxação desses complexos após a interação com o pósitron, e como se apresenta o comportamento desses sistemas. A simulação computacional a presença do e+, é ligada ao átomo mais eletronegativo do sistema, gerando uma nova geometria.

Leva-se em consideração o tempo de vida do positrônio, que é cerca de 10^{-9} s e o tempo de vibração molecular é de 10^{-11} s, logo é possível fazer o estudo dessa relaxação antes da aniquilação pósitron-elétron.

Para a molécula de cisteína ($C_3H_7NO_2S$), a posição preferencial para o pósitron se ligar está na interação com a molécula de enxofre, após a ligação ocorre mudanças significativas nas distâncias internucleares entre átomos, o que comprova o relaxamento do sistema.

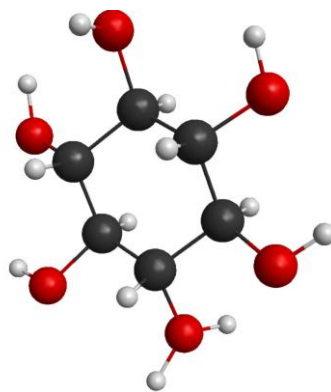
Na molécula da Glicose ($C_6H_{12}O_6$), segundo complexo estudado no trabalho, o pósitron tem 6 átomos de oxigênio para fazer a ligação, e mesmo após a interação mantém sua geometria simétrica. Também é possível observar um aumento das distâncias internucleares entre os átomos. O estudo da Glicose está sendo aprimorado, para construir modelagens com alterações na estrutura base da molécula, usando um isótopo radioativo modificado, para dar origem a modelagem do radiofármaco conhecido como ^{18}F -FDG.

FIGURA 1: MODELAGEM DA CISTEÍNA COM PRESENÇA DO PÓSITRON



fonte: autores

FIGURA 2: MODELAGEM DA GLICOSE COM PRESENÇA DO PÓSITRON



Fonte: autores

CONCLUSÕES/CONSIDERAÇÕES

Em ambos os casos verificou-se a formação de um estado ligado, formando os complexos $[e^+, C_3H_7NO_2S]$ e $[e^+, C_6H_{12}O_6]$, e as moléculas apresentaram uma relaxação devido a interação com o pósitron, aumentando suas distâncias internucleares, assim como suas modelagens estruturais. Os resultados ilustram os efeitos da FNMC e como a metodologia aplicada se torna eficaz para estes casos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ANDERSON, Carl David. The Positive Electron. *Physical Review*, v. 43, p. 491, 1933
- [2] Atkins P.; Friedman R.; *Molecular Quantum Mechanics*, OXFORD University Press, 2005
- [3] C. P. Gonçalves e J. R. Mohallem, *Theor. Chem. Acc.* 110 (2003) 367.
- [4] C. P. Gonçalves e J. R. Mohallem, *J. Comp. Chem.*, 25 (2004) 1736.
- [5] INSTITUTO NACIONAL DE CÂNCER. Diretrizes brasileiras para o uso do PET/CT com ^{18}F -FDG em oncologia. Rio de Janeiro: INCA, 2020.