

RESUMO - MODELAGEM DE MATERIAIS

ESTUDO COMPUTACIONAL DA INCORPORAÇÃO DE ÍONS METÁLICOS À MELANINA PARA APLICAÇÕES BIOMÉDICAS

João Pedro Dionizio (jp.dionizio@unesp.br)

Os compostos de dopamina do tipo melanina são amplamente utilizados no design de biomateriais, apresentando um enorme potencial para aplicações biomédicas. Esses compostos possuem alta biocompatibilidade e grupos funcionais ativos que permitem interações eficazes com diversas moléculas, enzimas e/ou íons. Um aspecto relevante é a capacidade da melanina de se quelar a íons, o que permite a formação de uma variedade de complexos bioativos. Em particular, o uso de complexos de melanina- Zn^{2+} tem sido relatado como um bactericida eficaz. Apesar do grande número de trabalhos na literatura, ainda existe uma lacuna notável no que diz respeito ao papel das interações íon-melanina para aplicações biomédicas, principalmente devido aos desafios envolvidos em sua análise experimental. Neste estudo, utilizamos cálculos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para avaliar complexos (oligoméricos) de melanina+ Zn^{2+} , a fim de compreender melhor a influência desse íon metálico nas propriedades eletrônicas desses materiais e destacar os possíveis mecanismos relevantes que regem sua atividade

bactericida. Foram avaliados índices de reatividade local e variações no comprimento das ligações.

Os resultados mostram que a presença do centro metálico nos oligômeros afeta as propriedades estruturais e a reatividade local dos sistemas, levando a uma intensa polarização elétrica e à ativação da reatividade do metal, que desempenha um papel relevante em sua interação com lipopolissacarídeos típicos presentes em bactérias gram-negativas. Nossos dados também são compatíveis com outros resultados espectroscópicos experimentais associados a tais sistemas, permitindo-nos interpretar efeitos adicionais da quelação de íons na estrutura eletrônica dos complexos. Essas descobertas aprofundam nossa compreensão da atividade antibacteriana do sistema, destacam as regiões mais responsivas da estrutura e abrem caminho para aplicações relacionadas.

Palavras-chave: melanina; bactericida; estrutura eletrônica; teoria do funcional da densidade.