

Utilização de índices gerados pelo Mopac como descritores topológicos no programa TOP.

Jorge Fábio Correia Lopes¹(IC), Porfírio Jesus das Neves(PQ)¹, João Batista Neves DaCosta(PQ)^{1*}

¹DEQUIM – ICE – UFRuralRJ - BR-465, Km 7 – Seropédica - Rio de Janeiro - CEP. 23.890-000 - *dacosta@ufrj.br

Palavras Chave: *descritores topológicos, índices de conectividade, TOP.*

Introdução

Avanços recentes em recursos computacionais, principalmente no que se refere a softwares voltados para a área de farmacologia química, têm possibilitado o desenvolvimento de um grande número de técnicas denominadas, de uma maneira geral, de Métodos de Modelagem Molecular, os quais são capazes de simular várias atividades ou propriedades de uma determinada droga, utilizando técnicas conhecidas como: Correlações entre Estrutura e Atividade (Q.S.A.R = Quantitative Structure Activity Relationships), e Correlações Quantitativas entre Estrutura e Propriedade (Q.S.P.R. = Quantitative Structure Property Relationships)ⁱ. Dentre esses avanços, os índices topológicos têm encontrado considerável sucesso na previsão de uma grande variedade de propriedades físicas, químicas e biológicasⁱⁱ.

A técnica que utiliza esses índices, geralmente chamados de descritores topológicos, são números ou combinações desses números derivados da estrutura molecular. O TOP, uma interface computacional desenvolvida pelo grupo de química teórica da UFRuralRJ para calcular tais índices^{iii a}, vêm sendo constantemente modificado com o propósito de contemplar outros descritores, e acima de tudo, adicionar novos módulos de manipulação de cálculos que facilitem a interpretação dos resultados obtidos, bem como combiná-los, a fim de se melhorar as correlações dos descritores com a atividade. Este trabalho teve como objetivo importar novos descritores gerados pelo Mopac, através da conversão dos dados elaborados pelo próprio programa no formato sybyl (*.mol). Para isto, foi utilizado o programa Babel, sendo que: tanto Mopac, quanto o Babel são programas livres.

Resultados e Discussão

Modificações anteriores no programa TOP, o possibilitaram, independentemente de outros programas de computador, elaborar o desenho das estruturas moleculares^{3-b,c}, além de introduzir um componente (F1Book), para organização e manipulação dos resultados gerados pelo TOP^{3-d}.

A linguagem de programação utilizada foi o Delphi 6.0, tendo-se a preocupação de manter a mesma metodologia utilizada no algoritmo anterior (Clipper

no que diz respeito ao tratamento de dados para a geração das subestruturas, e também com a opção de importar os arquivos com formato sybyl, gerados por outros programas, como por exemplo, o PCModel. Tanto estes arquivos importados como os gerados pelo programa são tratados pelo programa Babel, o qual converte os arquivos com a extensão *.mol para *.mop. E com esta conversão, é possível tratar os dados gerados pelo TOP com o Mopac, o que gera uma gama variada de informação, onde muitas podem ser utilizadas como descritores pelo TOP. Toda a operação é feita de maneira transparente ao usuário, o que descarta um conhecimento prévio da utilização do Babel. Quanto ao Mopac, o usuário deve ter algum conhecimento do Hamiltoniano que deve ser utilizado, já as palavras chaves são geradas pelo programa. Em função do Hamiltoniano empregado, é possível trabalhar com diferentes descritores, tais como, energia de homolumo, densidade eletrônica em diferentes átomos, momento dipolo, etc.

Conclusões

Com as últimas modificações no programa, aliadas as constantes modificações na sua aparência, a fim de facilitar a sua utilização pelo usuário. O programa TOP vem sendo melhorado cada vez mais, visando facilitar a manipulação e o entendimento dos dados gerados. Trilhando, desta forma, sua trajetória para se tornar uma importante ferramenta para utilização nos mais variados campos da química. E a incorporação dos dados gerados pelo Mopac só vem a contribuir com esta jornada, incorporando uma maior confiabilidade ao programa.

Agradecimentos

Ao CNPq e a CAPES pela bolsa e auxílio financeiro

ⁱ Devillers, J. and Balaban, A.T., Eds. Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and Drug Design. Gordon&Breach, Amsterdam (The Netherlands), **2000**.

ⁱⁱ Kier, L. B., Hall, L. H., Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research, Academic Press, New York, **1976**.

^{iii a} Neves, P. J., DaCosta, J. B. N., Ndiyaie, P. M., Carneiro, J. W. M., Química Nova, **1998**, 21(6), 709-713. ^b Silva, A. C., Neves, P. J., DaCosta, J. B. N., Carneiro, J. W. M., Resumo da 23a. Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, vol. 3 QT-044. ^c Silva, A. C., Neves, P. J., DaCosta, J. B. N., Resumos da 23o Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, **2000**, vol. 1,

211. d) Lopes, J. F. C., Neves, P. J., Gonçalves, V. T., DaCosta, J. B. N., Resumo da 29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, vol. 3 QT-055.