

Resumo

Nesta dissertação é apresentado o trabalho realizado no formalismo de Carvalho e Melo (2005). O formalismo, baseado no método de decomposição de energia introduzido por Melo e Ramos (1999), tem como objectivo identificar as componentes energéticas associadas a interações físico-químicas fundamentais mais importantes nos processos de associação molecular e a amplitude da perturbação gerada por uma associação deste tipo.

Este método de decomposição da energia de estabilização foi desenvolvido dentro de um formalismo semi-empírico. Foram estudados diferentes sistemas: condensação de alcanos, arginina-glutamato, lisina-glutamato, guanósina-citosina e o complexo da proteína inibidora da tripsina da abóbora com o glicerol. Nas componentes fundamentais, o termo não ligante revelou-se preponderante para o valor final da energia de estabilização em todos os processos estudados. No entanto, a polarização e transferência de carga e o termo ligante têm um papel importante para a compreensão a um nível mais detalhado. A extensão da região perturbada foi determinada para minimizar apropriadamente o termo de alcance curto de polarização e transferência de carga da região fracamente perturbada para obter valores inferiores a 10 % do valor total da energia de estabilização.

Abstract

The present dissertation describes the research work proposed as the formalism of Carvalho and Melo (2005). This formalism, based on the energy decomposition method early introduced by Melo and Ramos (1999), aims to identify the energy components associated with the fundamental physically meaningful components in molecular association processes, and evaluates the range of the perturbation originated by one such association process. This partition scheme was developed in a semiempirical formalism. Various systems have been studied: a series of covalent association processes involving alkanes, and interactions between the pairs: arginine-glutamate, lysine-glutamate, guanine-cytosine and the squash trypsin inhibitor with glycerol. For all the processes studied, the nonbonding energy is the most important component conditioning the value of the overall stabilization energy. However, the bonding and the polarization plus charge transfer components have an important corrective role for a more detailed level of understanding. The extension of the perturbed region has been appropriately selected to minimize the, short-range in nature, polarization plus charge transfer bulk term to obtain values smaller than 10 % of overall stabilization energy.