

AVALIAÇÃO DA INTERAÇÃO DO ÁCIDO OLEICO COM COMPOSTO REVELADOR DE DIGITAIS VIA TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE

AUGUSTO CARDOZO ARGONDIZZO¹; ROBSON DA SILVA OLIBONI²

¹Universidade Federal de Pelotas – argondizzzo@gmail.com

²Universidade Federal de Pelotas – rooliboni@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

A datiloscopia é um método biométrico de identificação humana por meio das digitais dos dedos das mãos e pés (MALTONI *et al*, 2005). A qualidade da coleta de impressões digitais depende da interação entre o composto revelador e a composição química da digital, que é constituída por uma mistura complexa de substâncias secretadas por nossas glândulas. Segundo estudos realizados por Frick *et al*. (2015) afim de elucidar os lipídeos presentes na digital, com o uso de cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas, mostrou que o ácido oleico está entre os cinco compostos mais abundantes nesta.

Tendo em vista a necessidade de bons reveladores para uma visualização adequada da impressão digital, foi proposta a investigação da interação entre um composto derivado da curcumina, denominado composto 2b (Figura 1), e o ácido oleico, que como citado anteriormente é um dos principais lipídeos presentes em impressões digitais latentes. Este composto foi o que obteve melhor resultado segundo escala de avaliação proposta por Sears *et al*. (2012) entre os três derivados de curcumina sintetizados por Poletti (2020). Para avaliar a interação entre os dois compostos citados foi utilizada a Teoria do Funcional de Densidade (DFT).

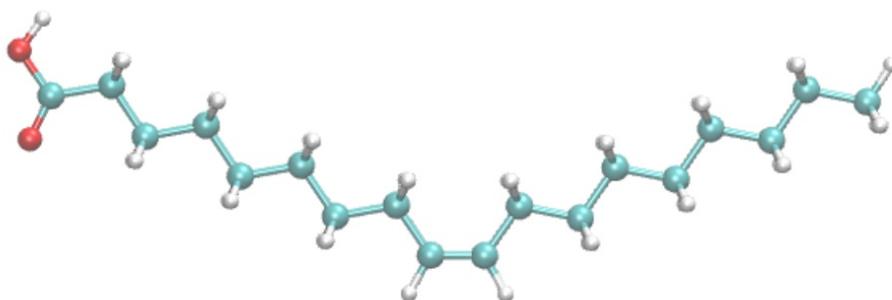


Figura 1: Estrutura otimizada do ácido oleico



Figura 2: Estrutura otimizada do composto 2b

2. METODOLOGIA

As estruturas do ácido oleico e do composto 2b foram desenhadas utilizando o programa avogadro (HANWELL *et al.*, 2012) e pré-otimizadas com uma ferramenta do programa. As coordenadas cartesianas obtidas para cada composto foram utilizadas para calcular as estruturas de mínimo, pelo método DFT, com o programa ORCA (NEESE, 2019). Posteriormente, foi simulada a interação entre os compostos utilizando as estruturas de mínimo. Em todos os cálculos foi empregado o funcional BP86, a base de Ahlrichs def2-TZVP e a base auxiliar def2/J, juntamente com o corretor de dispersão D3BJ. Para a visualização dos orbitais moleculares foi usado o Gabedit (ALLOUCHE, 2010) para ler os arquivos gerados através do utilitário do ORCA, *orca_plot*.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para avaliar a interação entre o composto 2b e o ácido oleico, as estruturas otimizadas destes dois compostos, expostos nas Figuras 1 e 2, foram agrupadas em um arquivo formando um dímero das estruturas. As moléculas foram dispostas de forma que a interação se deu lateralmente e a distância média entre os carbonos do anel central do composto 2b e os dois carbonos centrais do ácido oleico foi de 4,763 Å. Como observado em outros sistemas hidrofóbicos, é esperado que ocorra interação de Van der Waals entre os compostos.

A otimização do dímero pode ser observada na Figura 3. A diferença de energia calculada entre o dímero e as moléculas separadas é de -94,4 kJ/mol, demonstrando estabilidade na interação das mesmas. Analisando o orbital de fronteira HOMO nota-se interação lateral entre os orbitais p paralelos das duas moléculas, formando uma ligação π (Figura 4). Enquanto o LUMO encontra-se completamente localizado no composto 2b.

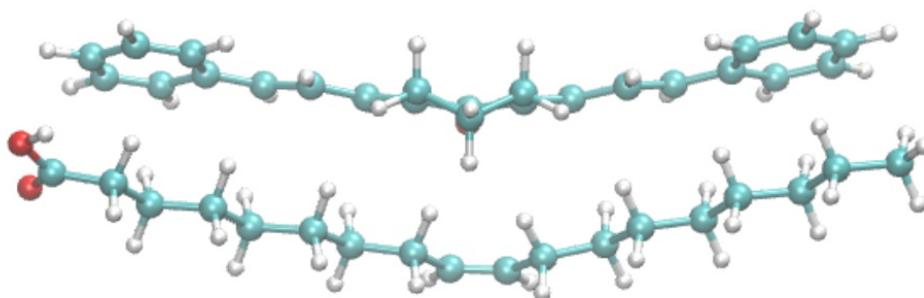


Figura 3: Dímero das estruturas

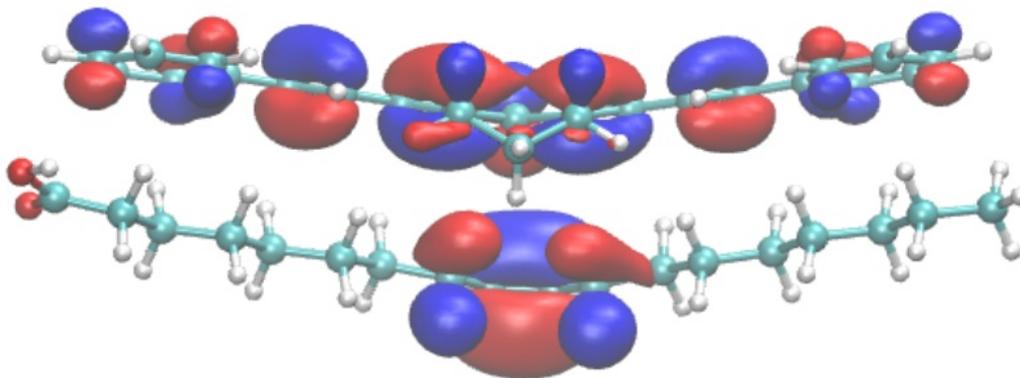


Figura 4: HOMO da otimização das estruturas

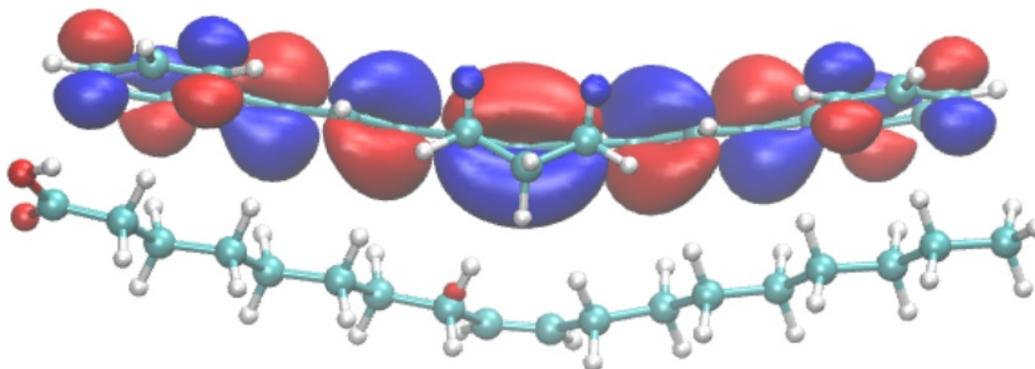


Figura 5: LUMO da otimização das estruturas

4. CONCLUSÕES

Com os resultados obtidos conclui-se que a interação lateral das estruturas é favorável visto que a energia do dímero é menor do que as energias das estruturas separadas. Ainda é possível atestar que a parte polar do ácido oleico não participa da ligação.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

MALTONI, D., MAIO, D., JAIN, A.K., PRABHAKAR, S. **Handbook of fingerprint recognition**. New York: Springer-Verlag, 2003.

FRICK, A.A., CHIDLOW, G., LEWIS, S.W., VAN BRONSWIJK, W. Investigations into the initial composition of latent fingerprint lipids by gas chromatography-mass spectrometry. **Forensic Science International**, Ireland, v.254, n. 9, p. 133-147.

POLETTI, T. **Curcuminas sintéticas: estudo das propriedades químicas e avaliação como materiais reveladores de impressões digitais.** 2020. Dissertação (Mestrado em Ciência de Engenharia de Materiais) – Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais, Universidade Federal de Pelotas.

Avogadro: an open-source molecular builder and visualization tool. Version 1.2. HANWELL, Marcus D et al., 2012. Disponível em: <<http://avogadro.cc>>. Acesso em: 27 de julho de 2022.

ORCA: an ab initio, DFT and semiempirical SCF-MO Package. Versão 4.2.1. NEESE, Frank et al., 2019. Disponível em: <<https://orcaforum.kofo.mpg.de>>. Acesso em: 27 de julho de 2022.

Gabedit: The Graphical User Interface for Computacional Chemistry Package. Versão 2.3.1. ALLOUCHE, Abdul-Rahman, 2010. Disponível em: <<http://gabedit.sourceforge.net/>>. Acesso em: 27 de julho de 2022.