

# Estudo de Bases e Métodos *ab initio* em Complexos: [Mg(H<sub>2</sub>O)<sub>5</sub>]<sup>2+</sup>–Bases Nucleicas

Vytor P. Oliveira & Edgardo Garcia

Neste trabalho, nós apresentamos a importância de incluir efeitos de correlação eletrônica nas interações entre o Mg e bases nucleicas; descrevemos uma metodologia para escolher um conjunto de bases balanceado, e demonstramos que a correção de Counterpoise para o erro de superposição de base (BSSE) nem sempre leva a resultados melhores, quando comparado aos valores não corrigidos.

**Palavras-chave:** *Mg base nucleica, correlação eletrônica, counterpoise.*

In this work, we present the importance of including electron correlation effects in Mg nucleobasis interactions; we described a methodology to choose a well-balanced basis set, and we demonstrate that the Counterpoise correction for BSSE does not always lead to better results, when compared with uncorrected values.

**Keywords:** *Mg nucleobasis, electron correlation, counterpoise.*

# Introdução

O presente trabalho tem como objetivos criar uma metodologia capaz de descrever as interações entre bases nucleicas e o magnésio penta hidratado avaliando a magnitude de efeitos como a correlação eletrônica, e o erro de superposição de base (BSSE), para diversos conjunto de bases de Pople e Dunning com a finalidade de definir um método *ab initio* e um conjunto de base com melhor razão entre qualidade e custo computacional tendo como parâmetro de referência o conjunto de base de alto custo aug-cc-pVTZ. Esta metodologia poderá então ser utilizada futuramente no estudos de complexos maiores semelhantes.

## Metodologia

Utilizando o software Gaussian09, 8 complexos descritos na literatura como os mais estáveis<sup>1,2</sup> representadas na Figura 1, tiveram suas estruturas otimizada pelo método MP2/aug-cc-pVDZ. Mantendo a geometria fixa estimou-se a energia de complexação ( $\Delta E$ ) da seguinte forma:

$$\Delta E = E_{AB}^{AB} - (E_A^A + E_B^B) \quad (1)$$

em que A se refere a base nucleica e B ao  $[\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$ , os valores subscritos são referente aos átomos e os sobreescritos, às funções de base.

Utilizando o método de Counterpoise (CP)<sup>3</sup> estimou-se a energia de complexação corrigida da seguinte maneira:

$$\Delta E^{cp} = E_{AB}^{AB} - (E_A^{AB} + E_B^{AB}) \quad (2)$$

Para quantificar de forma qualitativa o custo computacional (C.C) de cada conjunto de base no método MP2, utilizou-se a seguinte formula:

$$C.C = \left( \frac{\text{Nº FUNÇÕES DE BASE}}{\text{do conjunto de base estudada}} \right)^5 \quad (3)$$

## Resultados

**Correlação eletrônica:** O método HF não foi capaz de descrever de forma qualitativa os valores de  $\Delta E$ ,

superestimando a Gua-O2 em relação aos complexos Gua-O1, Cyt-O2, e Ade-O1, Ade-O4 quando comparado aos valores obtidos por MP2. Indicando que efeitos como polarização, dispersão e transferência de cargas tenham papel importante na descrição das interações desses complexos (Figura 2).

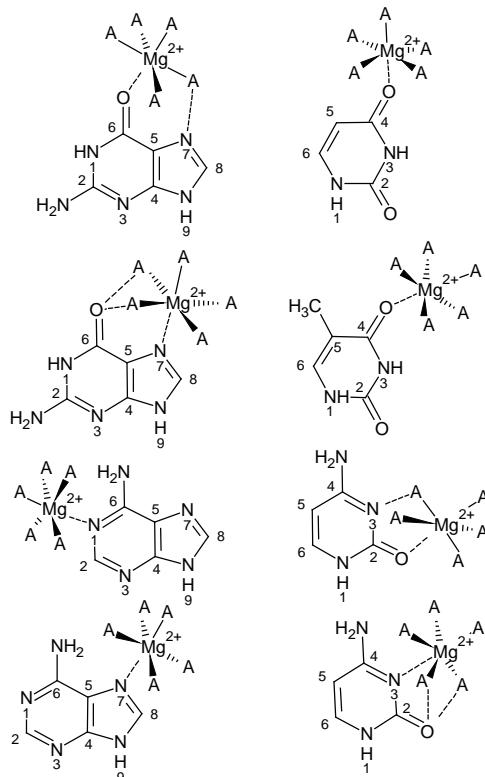


Figura 1. Complexes estudados Gua-O1, Ura-O1, Gua-O2, Th-O1, Ade-O1, Cyt-O2, Ade-O4 e Cyt-O3

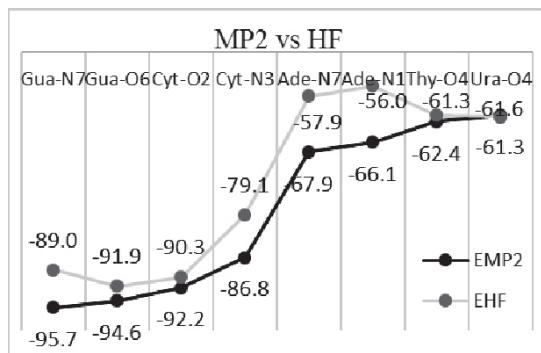
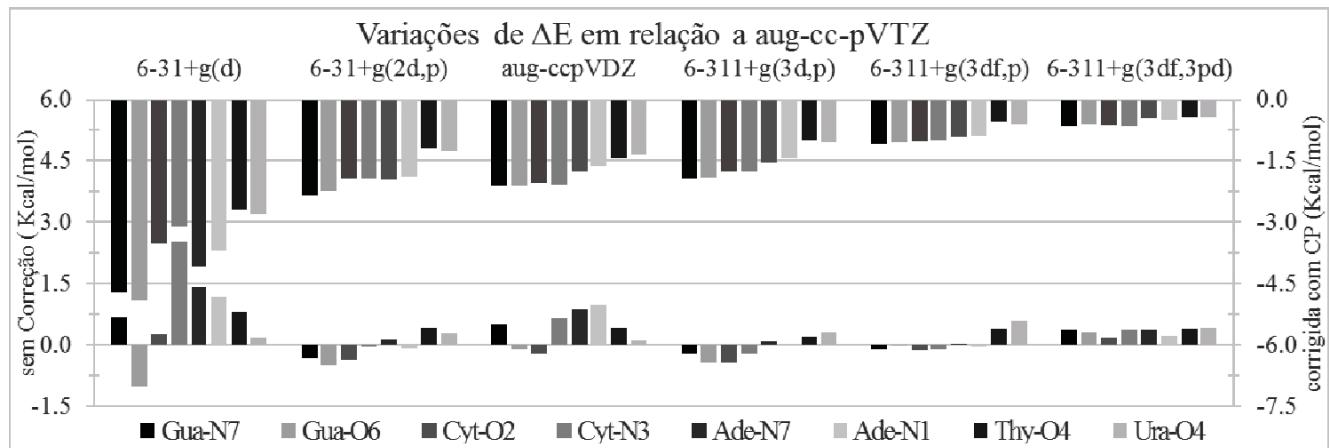


Figura 2. Energias de complexação dadas em kcal/mol.



**Figura 3.** Calculos realizado utilizando o método MP2; eixo inferior: variação do valor de  $\Delta E$  sem correção para o BSSE em relação a aug-cc-pVTZ, eixo superior: variação de  $\Delta E$  com correção CP para o BSSE.

**Erro de superposição de base:** O método (CP), levou a erros maiores em relação ao valor do conjunto de base de referência quando comparados aos valores sem correção (Figura 3, Tabela 1).

**Tabela 1.** Estimativa do custo computacional de cada função de base para o método MP2.

| Custo Computacional (C.C) |       |
|---------------------------|-------|
| 6-31+G(D)                 | 1.0   |
| 6-31+G(2D,P)              | 5.6   |
| aug-cc-pVDZ               | 7.2   |
| 6-311+G(3DF,P)            | 44.0  |
| 6-311+G(3DF,3PD)          | 117.4 |
| aug-cc-pVTZ               | 319.1 |

## Conclusão

Métodos correlacionados devem ser utilizados em complexos do tipo Mg-N; A metodologia de melhor razão entre qualidade e custo computacional foi MP2/6-31+g(2d,p), com resultados semelhantes aos de MP2/aug-cc-pVDZ, a um menor custo computacional. Não

há necessidade de se utilizar a correção de Counterpoise (CP) para o BSSE em tais complexos, uma vez que esta não levou a resultados mais precisos quando comparados aos valores não corrigidos.

## Referências

- Solt, I. Simon, A.G. Császár, M. Fuxreiter J. Phys Chem B, **2007**, 111, 6272-6279.
- Prado, M. A. Estudo teórico das interações Mg<sup>2+</sup> e bases nucleotídicas. 2006. 98 f. Tese (Doutorado em Química)- Universidade de Brasília, Brasília, **2006**.
- Boys, S. F.; Bernardi, F. Mol. Phys. **1970**, 19, 553.

Vytor P. Oliveira\* & Edgardo Garcia

Universidade de Brasília, Instituto de Química 70904-970, Brasília DF, Brasil

\*e-mail: vytor\_@hotmail.com