

Desenvolvimento e Parametrização do Método Semiempírico RM1 para Níquel.

Larissa Tavares de Jesus^a (G), José Diogo Lisboa Dutra^{a,b} (PG), Manoel Alves Machado Filho^a (PG), Alfredo Mayall Simas^b (PQ) e Ricardo Oliveira Freire^a (PQ)

^a Pople Computational Chemistry Laboratory, Departamento de Química, UFS, 49.100-000 – São Cristóvão, SE, Brasil.

^b Departamento de Química Fundamental, UFPE, 50.740-540, Recife, PE, Brasil.

Palavras-Chave: RM1, Parametrização, Métodos Semiempíricos, Níquel.

INTRODUÇÃO

O níquel, é um dos 5 elementos ferromagnéticos. Evidências sugerem que o níquel pode ser um elemento essencial para mamíferos¹. Ele ocupa o sítio ativo de seis dos diversos tipos de enzimas desidrogenases, tais como acetil-CoA e Urease, de grande importância nos mais diversos organismos². Atualmente, os métodos PM6 e PM7 são os únicos métodos semiempíricos capazes de tratar sistemas moleculares que contém átomos de níquel. Neste trabalho apresentamos a parametrização do método semiempírico RM1³ para o átomo de níquel com a inclusão explícita de orbitais do tipo s, p e d no conjunto de base.

METODOLOGIA

Através de uma pesquisa no banco de dados *Cambridge Structural Database* – CSD, 146 complexos contendo átomos de níquel foram selecionados. Utilizando a técnica estatística DIANA, realizamos uma análise de agrupamentos hierárquicos, com o objetivo de separar as estruturas para a formação dos conjuntos de parametrização. Foram selecionadas 13 estruturas para compor o conjunto de parametrização reduzido e 36 estruturas para compor o conjunto de parametrização expandido. O conjunto teste foi composto por todas as 146 estruturas. Após a parametrização do modelo que durou vários meses, procedemos com a validação dos parâmetros obtidos. Os Erros Médios Absolutos - EMA (Eq. 1) foram utilizados no procedimento de validação.

$$EMA = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |R_j^{CSD} - R_j^{calc}| \quad (1)$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O processo de validação do modelo considerou todos os métodos semiempíricos disponíveis para cálculo de sistemas contendo

átomos de níquel. Analisando os erros apresentados na tabela 1, verifica-se que o RM1 possui menores erros para a maioria dos tipos de ligação existentes nos sistemas que compuseram o conjunto teste.

Tabela 1: Comparação entre erros obtidos com os métodos RM1, PM6 e PM7.

	Nº de medidas	Erro Médio Absoluto (Å)		
		RM1	PM6	PM7
Ni – Ni	14	0,2792	0,7062	0,5502
Ni – O	112	0,0731	0,4626	0,2213
Ni – N	221	0,0763	0,1185	0,1986
Ni – C	71	0,1040	0,0638	0,0965
Ni – S	107	0,1336	0,1246	0,1084
Ni – P	107	0,1978	0,0348	0,1125
Ni – F	1	0,0268	0,1157	0,878
Ni – Cl	44	0,1003	0,1578	1,3705
Ni – Br	27	0,0460	0,0908	0,2264
Ni – L	711	0,1101	0,1681	0,246
L – L	1219	0,2292	0,3223	0,5064
Todas	1930	0,1853	0,2655	0,4105

CONCLUSÕES

A análise geral dos erros obtidos com os métodos PM6, PM7 e RM1 mostra que o RM1 apresenta uma redução de 30% e 55% em relação aos métodos PM6 e PM7 respectivamente.

AGRADECIMENTOS

FAPITEC-SE, FACEPE, CAPES, INCT-INAMI E CNPq.

¹ K.K. Das.; S.N. Das.; S.A. Dhundasi., *Indian J Med Res*, 128, 412, (2008).

² W.R. Stephen, *Current Opinion in Chemical Biology*. 2, 208, (1998).

³G.B. Rocha.; R. O. Freire, A. M. Simas, J. J. P. Stewart, *J. Comput. Chem*. 27, 1101, (2006).