



Simpósio de Integração Acadêmica

“Ciências Básicas para o Desenvolvimento Sustentável”

SIA UFV 2023



Uma visão topológica da quiralidade molecular

Gabriel Teixeira Guerra ; Orientador: Bulmer Mejia Garcia
Palavras-chave: Topologia, Quiralidade, Grafos

Introdução

Quiralidade é o nome dado a uma propriedade de compostos moleculares que podem existir em uma de duas configurações espelhadas e que não são interconversíveis. Ao olhar para moléculas de maior complexidade, a identificação dessas formas se torna mais difícil pelo maior número de átomos envolvidos. Para solucionar esse problema é possível enxergar a estrutura da molécula como um grafo e aplicar técnicas de topologia matemática para caracterizar se duas configurações de uma molécula são ou não quirais entre si.

Objetivos

Este trabalho tem como objetivo identificar e estudar as técnicas matemáticas do campo da topologia de espaços euclidianos que podem ser utilizadas na caracterização da quiralidade de moléculas de estrutura complexa tais como compostos químicos, proteínas, DNA e RNA, inserindo o estudante no âmbito de pesquisa matemática. Além disso, procura identificar aplicações da propriedade nos campos da química, bioquímica e biologia molecular.

Material e Método

O projeto foi desenvolvido com uma metodologia de estudo sistemático da literatura existente sobre quiralidade topológica e também abrangeu as áreas de álgebra linear e topologia como forma de construir uma base teórica robusta sobre o tópico.

Resultados e Discussão

- Compostos quirais são estereoisômeros espelhados e que não podem ser sobrepostos entre si.
- Um grafo G é um conjunto não vazio V de elementos chamados vértices e um conjunto que pode ser vazio E de subconjuntos de dois elementos de V chamado arestas. Nós são mergulhos de um grafo S em \mathbb{R}^3 e links são a união de um ou mais nós.
- O nó trivial é uma curva fechada simples em \mathbb{R}^3 que é isotrópica a um círculo em um plano ou esfera. O link aberto é um link em \mathbb{R}^3 que é ambiente isotrópico a uma coleção de círculos desconexos em um plano.

HOMFLY (p -polinomial)

O p -polinômio $P(L)$ tem variáveis m e l e é definido a partir da projeção orientada de L por três axiomas.

1. $P(0) = 1$
2. Seja L, L_+ e L_0 as projeções orientadas de nós que são quase idênticos, variando apenas em um cruzamento, então $lP(L_+) + l^{-1}P(L_-) + mP(L_0) = 0$
3. $P(L)$ não é alterado pelo ambiente isotrópico de L .

Teorema: Seja L um nó orientado com p -polinomial $P(L)$. Seja $P'(L)$ o polinômio obtido pela inversão de l por l^{-1} , se $P(L)$ for diferente de $P'(L)$ então L é topologicamente quiral.

Invariante de Kauffman

Para um vértice mergulhado rígido tetravalente de um grafo G , define-se $C(G)$ como a coleção de nós e links associados a G por substituição sucessiva de todos os discos do vértice, juntamente com as quatro arestas originárias dele, como demonstrado na figura.

Teorema: Seja G um vértice tetravalente mergulhado em \mathbb{R}^3 . Se existir um elemento de $C(G)$ que for topologicamente quiral e não puder ser deformado à sua imagem espelhada de nenhum elemento de $C(G)$, então G é topologicamente quiral como um grafo de vértice rígido.

Conclusões

- Moléculas orgânicas complexas e biomoléculas como proteínas, DNA e RNA podem formar nós e links que podem ser quirais.
- Dizer que um grafo molecular é topologicamente quiral significa que a sua estrutura, mergulhada em um espaço tridimensional, não pode ser deformada em sua forma espelhada.
- A presença dessas estruturas em biomoléculas tem função biológica pouco explorada, mas estão possivelmente associadas a estabilidade térmica e resistência à degradação.

Bibliografia

- A course in calculus and real analysis. New York, NY: Springer Science+Business Media, 2018.
- CHARTRAND, G.; LESNIAK, L.; ZHANG, P. *Graphs & Digraphs*. 6. ed. New York: Chapman and Hall/CRC, 2015.
- ERICA FLAPAN. *When Topology Meets Chemistry: A Topological Look at Molecular Chirality*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- FLÁVIO ULHOA COELHO; MARY LILIAN LOURENÇO. *Um Curso de Álgebra Linear*. São Paulo: Edusp, 2001.
- NICOLE C. H. LIM; LIM, N. C. H.; JACKSON, S. E. Molecular knots in biology and chemistry. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 27, n. 35, p. 354101-354101, 20 ago. 2015.
- ROLFSEN, D. *Knots and links*. Providence, R.I: AMS Chelsea Pub, 2003.
- VIRNAU, P.; MIRNY, L. A.; KARDAR, M. Intricate Knots in Proteins: Function and Evolution. *PLOS Computational Biology*, v. 2, n. 9, 1 jan. 2005.

Apoio financeiro

