

## NOTAS TÉCNICAS

### Programa de Computador para Calcular Coordenadas e Distâncias Interatômicas em Moléculas

Alberto N. Senapeschi

Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos – Caixa Postal 676 – 13.560  
São Carlos, SP – Brasil

Andrejus Korolkovas

Departamento de Farmácia, Faculdade de Ciências Farmacêuticas – USP  
São Paulo – Brasil

(Recebido em 20/3/78)

Em farmacologia quântica é muito importante conhecer as distâncias interatômicas e a distribuição espacial dos átomos dos fármacos a partir de suas coordenadas. Embora existam alguns programas de computador que determinam tais medidas, via de regra são escritos para computadores de grande memória. Por essa razão, escreveu-se um programa que calcula tais medidas utilizando um minicomputador HP 2100 que possui apenas 64 *kbytes* palavras de memória.

O programa DPCIL (Principal), escrito em linguagem Fortran IV, está dividido em quatro segmentos: LETUR, ZONA, COORD e FONTE (Fig. 1).

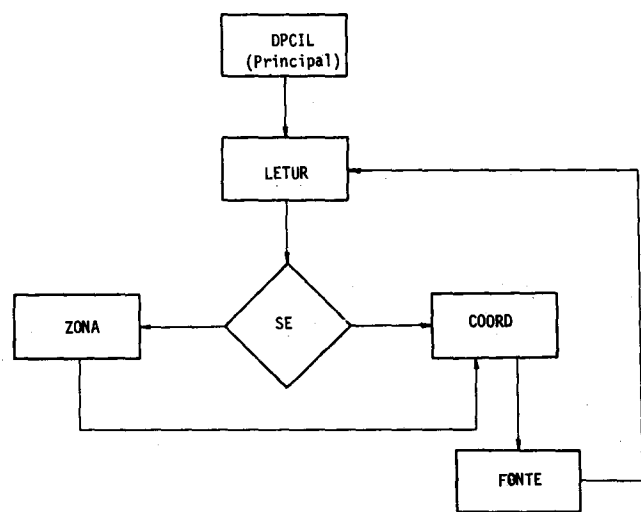


Fig. 1 Estrutura fundamental do programa de computador DPCIL

Inicialmente o segmento LETUR lê e escreve os dados de entrada. Em seguida, apresenta duas opções controladas pelo comando SE: na primeira, vai diretamente para o segmento COORD, onde são calculadas as coordenadas e as distâncias interatômicas; na segunda, passa antes pelo módulo ZONA, fornecendo um mapeamento da molécula separada em regiões. A fase final do programa é o segmento FONTE, que encerra os cálculos ou faz retornar ao LETUR para reiniciar outro cálculo.

O programa é bastante rápido e contém cerca de 700 cartões, incluindo os comentários. Pode ser utilizado para moléculas com até 200 orbitais atômicos. Aplica a parametrização do método CNDO/2 escrito por Pople e Beveridge<sup>1</sup>, também usada no programa PCILO diferencial por Daudey<sup>2</sup>.

A entrada de dados para o programa baseia-se fundamentalmente na geometria da molécula, em termos de comprimentos de ligações, ângulos entre as ligações e ângulos diédricos.

Como resultados práticos da utilização do programa selecionamos os dados obtidos para a conformação preferida da molécula de lucantona, conhecida comercialmente como

átomo	x	y	z
1	0,00000	0,00000	0,00000
2	1,50000	0,00000	0,00000
3	2,19262	1,33052	0,00000
4	3,58072	1,40326	0,00000
5	4,20722	2,63285	-0,00000
6	3,51722	3,82797	-0,00000
7	2,13980	3,74372	-0,00000
8	1,49797	2,51077	-0,00000
9	2,10087	-0,98054	0,00000
10	-0,18769	2,89994	0,00000
11	-0,70000	1,21243	0,00000
12	-2,08879	1,27034	0,00000
13	-2,78151	2,62332	0,00000
14	-2,84821	0,11809	0,00000
15	-2,15587	-1,07567	0,00000
16	-0,77762	-1,14519	0,00000
17	-0,13959	-2,39135	0,00000
18	-0,93779	-3,62576	0,00000
19	-0,00948	-4,82936	0,00000
20	-0,80768	-6,06377	0,00000
21	-0,49182	-6,85150	1,20026
22	-0,81841	-6,03692	2,44130
23	-0,49184	-6,85156	-1,20022
24	-1,42517	-6,44920	-2,33044
25	4,16893	0,49750	0,00000
26	5,28685	2,66112	0,00000
27	4,02841	4,77933	-0,00000
28	1,55159	4,64948	-0,00000
29	-2,48971	3,18088	0,88999
30	-3,86183	2,47836	0,00000
31	-2,48971	3,18088	-0,88999
32	-3,92777	0,14896	0,00000
33	-2,71836	-1,99762	0,00000
34	0,84915	-2,44123	0,00000
35	-1,56655	-3,65189	-0,88999
36	-1,56655	-3,65189	0,88999
37	0,61928	-4,80323	-0,88999
38	0,61928	-4,80323	0,88999
39	-1,08369	-7,76681	1,20026
40	0,56843	-7,10438	1,20023
41	-0,58420	-6,62101	3,33129
42	-1,87867	-5,78403	2,44128
43	-0,22655	-5,12160	2,44125
44	0,54008	-6,66381	-1,49687
45	-0,62027	-7,91194	-0,98299
46	-1,19098	-7,03334	-3,22040
47	-1,29673	-5,38881	-2,54762
48	-2,45708	-6,63694	-2,03374

Tabela I. Coordenadas cartesianas zyx determinadas para a conformação preferida da lucantona neutra (a numeração dos átomos é a dada na Figura 2).

Miracil D (Fig. 2), usada em terapêutica como agente esquistossomocida. Os átomos na molécula foram numerados em ordem crescente, considerando-se primeiro os pesados e, depois, os de hidrogênio. Os resultados obtidos para as coordenadas da molécula estão arrolados na Tabela I, enquanto algumas das distâncias interatômicas determinadas aparecem na Tabela II.

átomos	dist. (Å)
9 - 17	2,648
17 - 20	3,733
10 - 13	2,608
13 - 20	8,908
13 - 24	9,465
17 - 24	4,853

Tabela II. Distâncias interatômicas determinadas entre alguns átomos (a numeração dos átomos é a dada na Figura 2).

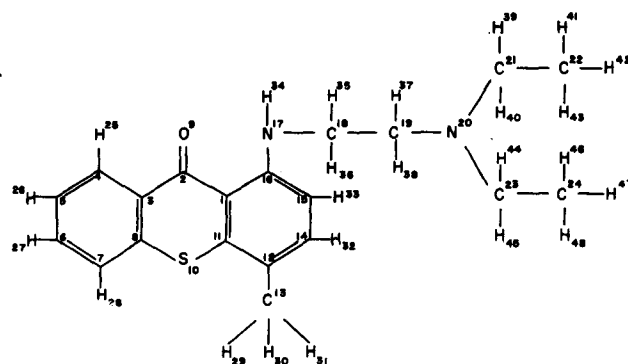


Fig. 2 Molécula de lucantona devidamente numerada

<sup>1</sup> J. Pople e D.L. Beveridge, *Approximate Molecular Orbital Theory* Ed., McGraw Hill Book Company, New York, 1970.

<sup>2</sup> J.P. Daudey, *Recherches sur la localisation et la transférabilité en chimie quantique*, Paris - França, TESE, 1975.

## NOTAS TÉCNICAS

### Componentes e Sistemas de Cromatografia Líquida. II. Colunas para Cromatografia de Média Pressão\*

Kenneth E. Collins e Pedro E. N. Cruz

Departamento de Química, Unicamp

Campinas, S.P. - Brasil

(Recebido em 11/4/78)

É conveniente classificar a cromatografia líquida em termos de três faixas de pressão usada para obter fluxo através das colunas. A faixa de "baixa pressão" envolve a cromatografia sem sistema externo de bombeamento, nominalmente cromatografia de baixa pressão corresponde a faixa de 0-1 kg/cm<sup>2</sup>; "média pressão" abrange a faixa de 1-40 kg/cm<sup>2</sup> (~500 p.s.i.), o qual é um limite prático para colunas de vidro com tubos de politetrafluoroetileno (PTFE), tendo diâmetro externo padrão de 1,5 ou 3 mm, usado para transferência de eluente<sup>1</sup>. A faixa para cromatografia de "alta pressão" corresponde a pressões maiores do que 40 kg/cm<sup>2</sup>; geralmente são usados tubos de transferência e colunas de aço inoxidável.

No passado somente se obtinha separações cromatográficas de "alta resolução", em trabalhos de rotina, usando "alta pressão" e colunas com pequeno diâmetro interno. Porém, foi mostrado recentemente<sup>2</sup> que é possível obter separações cromatográficas de alta resolução, na faixa de "média pressão", usando colunas com diâmetro interno maior do que os empregados anteriormente. Então, a cromatografia de média pressão tornou-se uma área ativa de cromatografia de alta resolução e bem prática; adequada para desenvolvimento e uso no Brasil.

Para tirar vantagem das colunas de vidro e dos acoplamentos fabricados facilmente no Brasil para aplicações em cromatografia de média pressão, nós desenvolvemos uma série de colunas e acoplamentos correspondentes com quatro tamanhos "padrões". Estes sistemas são montados rapidamente, fáceis de desmontar e limpar. É possível que sistemas de cromatografia líquida usando tais acoplamentos padrões possam permitir a laboratórios com orçamentos

pequenos tornarem-se razoavelmente equipados com base na "construção própria" de sistemas consistentes com cromatografia de alta resolução.

A Figura 1 mostra a forma geral dos tubos de vidro e das colunas. A Tabela 1 apresenta os tamanhos padrões das flanges dos tubos. Estes tubos com flanges podem ser fabricados numa oficina típica de vidraria. As flanges servem

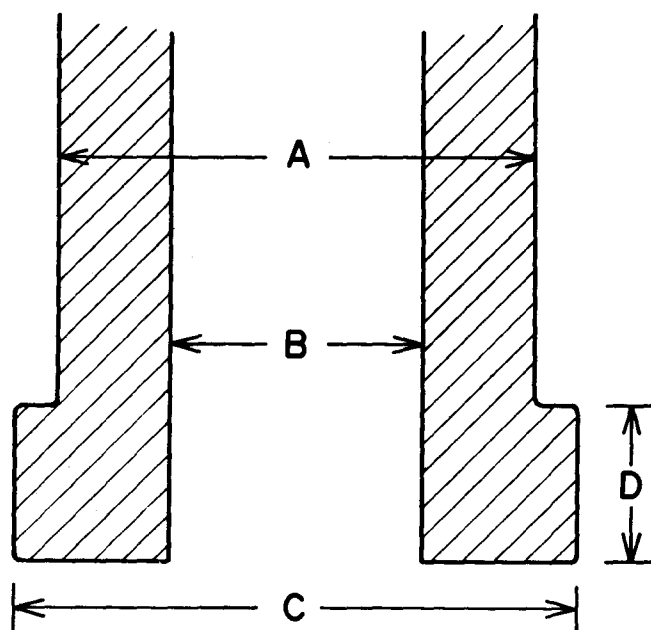


Fig. 1. Terminal do tubo de vidro para coluna cromatográfica.