

Espalhamento de Elétrons por Molécula Análoga da Desoxirribose: Tetrahydrofurano

H. V. Duque^{*1,2,3}, T. P. T. Do⁴, M. C. A. Lopes², D. A. Konovalov⁵, R. D. White⁵, M. J. Brunger^{1,6} e D. B. Jones¹

¹School of Chemical and Physical Sciences, Flinders University, Adelaide, Australia

²Departamento de Física, Universidade Federal de Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil

³Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Campus Leopoldina, Brasil

⁴School of Education, Can Tho University, Vietnam

⁵College of Science, Technology and Engineering, James Cook University, Townsville, Australia

⁶Institute of Mathematical Sciences, University of Malaya, Malaysia

O estudo dos processos de interação de radiações ionizantes com o DNA [1] demonstrou que estas radiações, ao interagirem com sistemas biológicos, podem levar à produção de um número significativo de elétrons secundários. Tais elétrons, por sua vez, ao realizarem colisões inelásticas com biomoléculas, as levam a estados excitados (estados vibracionais e eletrônicos) e à produção de estados ressonantes. Estudos recentes reportam que estes processos têm a real capacidade de causar mutação celular ou necrose, devido à simples e dupla quebra da cadeia de DNA, possuindo, portanto, grande potencialidade danosa a qualquer tecido vivo [2].

Com o intuito de entender melhor estas interações de elétrons de baixa energia com as espécies encontradas em sistemas biológicos, no presente trabalho utilizou-se a Espectroscopia de Perda de Energia de Elétrons para estudar as seções de choque diferenciais (SCD) e integrais (SCI) na região de energias de impacto que promove a excitação de níveis vibracionais do tetrahydrofurano (THF). Esta espécie molecular foi escolhida por ser quimicamente análoga aos anéis de açúcar presentes na estrutura do fosfato-desoxirribose, constituintes do DNA.

As energias de impacto de elétrons utilizadas para o THF, foram de 15, 20, 30 e 50 eV, enquanto o intervalo angular dos elétrons espalhados foi de 15°- 90°. A importância do momento de dipolo e polarizabilidade da presente molécula nos espalhamentos de elétrons foi verificada, principalmente seus reflexos nas SCD's para os baixos ângulos de espalhamento ($\leq 30^\circ$). Os dados obtidos, conjuntamente com os de Khakoo *et al.* [3], estendem-se por uma faixa de energia considerável, 2 – 50 eV, o que permitiu uma revisão do trabalho de Garland *et al.* [4], relativo a estudos teóricos de transporte de elétrons por gases de THF, demonstrando que a faixa de energia e os poucos modos vibracionais considerados em seu trabalho, derivados de Allan [5], dei-

xam a desejar no que tange a completude dos estudos das propriedades de transporte.

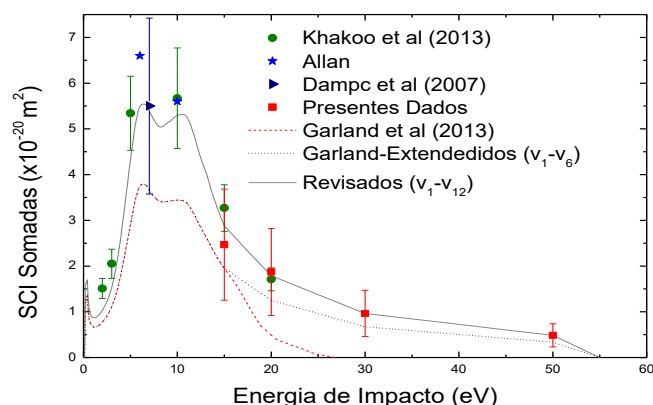


Figura 1: SCI's somadas para excitações vibracionais e THF.

Tal revisão se deu pelo cálculo dos coeficientes de transporte de elétrons em gases de THF utilizando o conjunto de dados de seções de choque vibracionais proposto. Este procedimento mostrou a importância das seções de choque vibracionais nos fenômenos de enxame de elétrons, obtendo diferenças de até 17% dos coeficientes de transporte obtidos por Garland *et al.* [4].

Referências

- [1] L. Sanche *et al.*, *Eur. Phys. J. D*, vol. 35, pp. 367–390, 2005.
- [2] M. a. Huels *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 125, no. 4, pp. 4467–4477, 2003.
- [3] M. a. Khakoo *et al.*, *Phys. Rev. A*, vol. 88, p. 012705, 2013.
- [4] N. a. Garland *et al.*, *Phys. Rev. A - At. Mol. Opt. Phys.*, vol. 88, pp. 1–10, 2013.
- [5] M. Allan, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.*, vol. 40, pp. 3531–3544, 2007.
- [6] M. Dampc *et al.*, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 443, pp. 17–21, 2007.
- [7] H. V. Duque *et al.*, *J. Chem. Phys.*, vol. 142, p. 124307, 2015.