

Espalhamento de Elétrons por Molécula Análoga da Desoxirribose: Álcool α -Tetrahidrofurfuril

H. V. Duque^{*1,2,3}, Luca Chiari¹, D. B. Jones¹, Zoe Pettifer¹, M. C. A. Lopes² e M. J. Brunger^{1,4}

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

⁴Institute of Mathematical Sciences, University of Malaya, Malaysia

Radiações ionizantes em sistemas biológicos podem levar à produção de um número significativo de elétrons secundários. Tais elétrons podem realizar colisões inelásticas com biomoléculas, levando estas a estados excitados (estados vibracionais e eletrônicos) e a produção de estados ressonantes. Estudos recentes reportam que tais processos têm a real capacidade de causar mutação celular ou necrose [1].

Afim de melhor compreender as interações de elétrons de baixa energia com espécies encontradas em sistemas biológicos, foi estudado no presente trabalho as seções de choque diferenciais (SCD) e integrais (SCI), para energias de impacto de excitação de níveis vibracionais e de bandas de Rydberg de álcool α -tetrahidrofurfuril (THFA) [2], [3]. Esta se mostra como uma opção quimicamente análoga dos anéis de açúcar presentes na estrutura de fosfato-desoxirribose presentes no DNA. Sendo THFA identificado recentemente, como uma melhor opção análoga à estrutura desoxirribose, quando comparado com a molécula de Tetrahidrofurano (THF)[4].

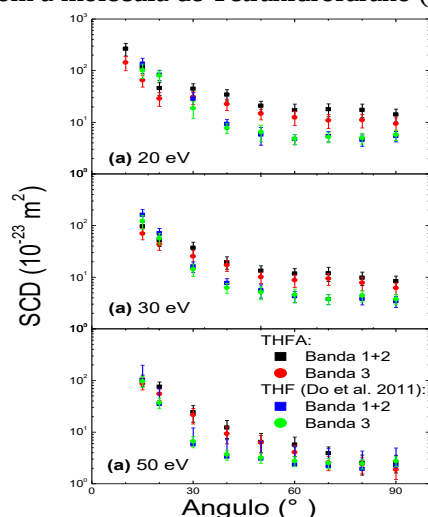


Figura 1: Comparação entre os presentes SCD's de excitação eletrônica dos estados de Rydberg para THFA, bandas 1+2 e 3, e os respectivos dados para THF apresentados por Do et al.[11].

As energias de impacto dos dados apresentados foram de 20-50eV, com SCD's analisadas no intervalo angular de 10°-90° para os elétrons espalhados. Os dados apresentados foram comparados com

os dados de seções de choque vibracionais apresentados por Khakoo *et al.* [5] e também com dados de seções de choque de estados eletrônicos de Do *et al.* [6], ambos de THF.

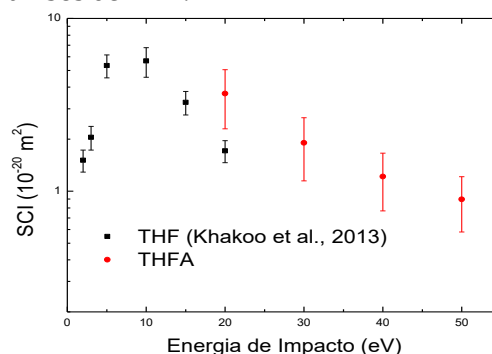


Figura 2: SCI's das bandas de excitações vibracionais somadas.

A importância do momento de dipolo e polarizabilidade das moléculas nos espalhamentos de elétrons foi verificada, principalmente seus reflexos nas SCD's para os baixos ângulos de espalhamento ($\leq 30^\circ$). Pôde-se perceber que fazendo a razão entre a polarizabilidade de dipolo de THFA e THF, obtém-se um valor dentro da faixa de erros da razão entre as SCI's a 20 eV somadas e aquelas de Khakoo *et al.* [5] também para energia de impacto a 20 eV. Tal evidência corrobora para o fato de que aquela característica físico-química tem importância destacada nos processos de excitação vibracional em moléculas [7].

Referências

- [1] L. Plante *et al.*, *New J. Phys.*, vol. 11, p. 063047, 2009.
- [2] H. V Duque *et al.*, *J. Chem. Phys.*, vol. 140, p. 214306, 2014.
- [3] L. Chiari *et al.*, *J. Chem. Phys.*, vol. 141, p. 024301, 2014.
- [4] M. Dampc *et al.*, *Phys. Rev. A*, vol. 75, p. 042710, 2007.
- [5] M. a. Khakoo *et al.*, *Phys. Rev. A*, vol. 88, p. 012705, 2013.
- [6] T. P. T. Do *et al.*, *J. Chem. Phys.*, vol. 134, no. May 2012, p. 144302, 2011.
- [7] H. V. Duque *et al.*, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 608, pp. 161–166, 2014.