
Interação entre o íon Ferro II e a Vitamina C usando Dinâmica Molecular de Car-Parrinello

OLIVEIRA, Samanta Araújo de Matos

Instituto Federal de Goiás, Câmpus Anápolis do(a) Autor(a) 1.

CAMARGO, Lilian Tatiane Ferreira de Melo

Instituto Federal de Goiás, Câmpus Anápolis do(a) Autor(a) 2.

O ferro é um mineral essencial ao organismo humano, atuando no transporte e armazenamento de oxigênio, na respiração celular e como cofator enzimático. Está presente principalmente na hemoglobina, mioglobina e citocromos. A deficiência de ferro pode resultar em anemia, alterações cardiovasculares e até câncer, enquanto seu excesso está relacionado à hemocromatose. A biodisponibilidade do mineral depende da sua forma, o ferro heme, de origem animal, apresenta maior absorção, enquanto o ferro não-heme, de origem vegetal, é menos biodisponível. A absorção do ferro não-heme é potencializada pela vitamina C, que participa do seu metabolismo, esta vitamina também atua como antioxidante, devendo ser obtida pela dieta, já que o organismo não a sintetiza. Apesar da existência de estudos experimentais sobre a interação ferro-vitamina C, ainda são limitadas as investigações em nível molecular. Neste contexto, o presente trabalho teve como objetivo investigar a interação entre o íon ferro (II) e a vitamina C por meio de Dinâmica Molecular *ab initio*. A molécula de vitamina C foi otimizada utilizando a Teoria do Funcional da Densidade no nível M062-X/6-31G**(d,p). Através de cálculos de cargas derivadas do potencial eletrostático (CHELPG) foi

determinado os índices de Fukui, que indicaram os oxigênios das hidroxilas como os sítios mais reativos frente ao íon Fe^{2+} . Em seguida, o íon ferro II foi posicionado a 3,686 Å de uma hidroxila, e a simulação foi realizada usando Dinâmica Molecular de Car-Parrinello, que trata os núcleos classicamente e os elétrons quanticamente, implementado no software CPMD. Foram utilizados pseudopotenciais de Vanderbilt, funcional de correlação e troca PBE e integração pelo algoritmo velocity-Verlet. A trajetória, analisada no software VMD, mostrou que em aproximadamente 1,064 ps o Fe^{2+} formou ligação estável como oxigênio da hidroxila, estabilizando a uma distância de aproximadamente 1,7 Å, que permaneceu até ao final da simulação. Observou-se ainda transferência do hidrogênio da hidroxila, envolvida na interação com Fe^{2+} , para o oxigênio da carbonila, evidenciando rearranjo estrutural induzido pela coordenação metálica. A energia livre de Helmholtz apresentou mínimo bem definido próximo a distância de ligação de 1,7 Å entre o metal e a molécula de vitamina C, confirmando a estabilidade do complexo. Os resultados indicam que a vitamina C interage com o íon ferro (II) formando ligação estável e transferência de hidrogênio intramolecular. Esses achados contribuem para a compreensão dos mecanismos moleculares da complexação ferro-vitamina C, fornecendo subsídios relevantes para estudos de biodisponibilidade e potenciais aplicações em sistemas biológicos e farmacológicos.

Palavras-chave

Vitamina C, íon ferro II, Dinâmica Molecular, Teoria do Funcional da Densidade

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio do Instituto Federal de Goiás.