



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2018
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Análise do comportamento da água na vizinhança de uma molécula de DNA
<b>Autor</b>	MATHEUS BRISOLA ANTONACCI
<b>Orientador</b>	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

# Análise do comportamento da água na vizinhança de uma molécula de DNA

Aluno: Matheus Brisola Antonacci

Orientadora: Márcia Cristina Bernardes Barbosa  
IF-UFRGS

16 de junho de 2018

A água é considerada por alguns autores a molécula da vida e, em verdade, muito se sabe sobre seu o comportamento, mas ele é complexo e possui diversas anomalias. Portanto, continua-se buscando um melhor entendimento sobre suas propriedades físico-químicas. Tal como a água, o DNA é base para o desenvolvimento da vida, estando presente em todos os seres vivos e, inclusive, alguns vírus.

Neste trabalho calculamos a mobilidade, distribuição e estrutura de moléculas de água na vizinhança do DNA. Usamos simulações de dinâmica molecular via Gromacs. O modelo de água empregado é o TIP3P e as temperaturas estudadas são 290k e 300k. Após separar as moléculas próximas do DNA das distantes (bulk), observamos que a mobilidade da água na vizinhaça do DNA não somente difere da mobilidade do bulk como apresenta diferenças dependendo de qual região do DNA é analisada.