



E449

**ESTUDO CONFORMACIONAL DO ÉSTER METÍLICO DA PROLINA, ATRAVÉS DAS ESPECTROSCOPIAS NO INFRAVERMELHO E DE RMN E CÁLCULOS TEÓRICOS**

Paula Gimenes, Carina R. Martins e Prof. Dr. Roberto Rittner Neto (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O estudo do comportamento conformacional dos aminoácidos naturais é importante pois sua estrutura e mobilidade determinam a variedade e a especificidade funcional das proteínas e polipeptídios. Aminoácidos exibem uma estrutura bipolar zwitteriônica no estado sólido e em meio polar, o que acarreta um problema quanto ao estudo da estabilidade conformacional de aminoácidos em solventes orgânicos apolares. Para contorná-lo, foi proposta a síntese e estudo do éster metílico do aminoácido, no caso a prolina, por meio de cálculos teóricos em conjunto com dados experimentais. A síntese foi realizada a partir da esterificação da prolina pela reação com cloreto de tionila e metanol. O composto foi caracterizado por RMN de  $^1\text{H}$  e de  $^{13}\text{C}$ . Determinou-se através de cálculos teóricos em nível B3LYP/cc-pVDZ a sua curva de "PES", que forneceu as suas conformações mais estáveis. Foram feitos também cálculos de energia e frequência para essas conformações, com correção de ZPE em nível B3LYP/aug-cc-pVDZ. Estes dados foram comparados com dados experimentais de infravermelho, que possibilitaram a verificação da variação das populações dos confôrmeros com a variação da polaridade do meio.

Análise conformacional - Cálculos teóricos - Espectroscopia de RMN