



E0454

ANÁLISE CONFORMACIONAL DO ÉSTER METÍLICO DO ÁCIDO ASPÁRTICO POR ESPECTROSCOPIA DE RMN, INFRAVERMELHO E CÁLCULOS TEÓRICOS

Aline A. Macedo (Bolsista PIBIC/CNPq), Carina R. Martins e Prof. Dr. Roberto Rittner Neto (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O estudo do comportamento conformacional de aminoácidos naturais é de grande interesse, pois sua estrutura e mobilidade determinam a variedade e a especificidade funcional das proteínas e polipeptídeos. Aminoácidos exibem estrutura zwitteriônica no estado sólido e em meio polar e, por isso, estudos da sua estabilidade conformacional em solventes orgânicos são pouco explorados. Para contornar este problema foi proposto o estudo do éster metílico do ácido aspártico, por meio de cálculos teóricos em conjunto com dados experimentais. A partir da curva de PES, em nível B3LYP/cc-pVDZ foram obtidas as conformações mais estáveis no vácuo e feitos cálculos de energia e frequência com a correção do ZPE em nível B3LYP/aug-cc-pVDZ. O composto, obtido a partir da esterificação do aminoácido pela reação com cloreto de tionila e metanol, apresentou variação no $^1J_{CH}$ com o aumento da polaridade do solvente, indicando mudança na população conformacional. A partir destes dados, utilizando o programa Bestfit, foi possível determinar a população de cada confômero em determinado solvente. Este comportamento também foi observado em seu espectro de IV, onde duas bandas na região fundamental do estiramento C=O mostram a variação de 47% do confômero asp1 em CCl₄ para 56% em CH₃CN.

Análise conformacional - Aminoácidos - Cálculos teóricos