



E0475

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

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

A estrutura e mobilidade conformacional dos aminoácidos naturais determinam a variedade e especificidade funcional das proteínas e polipeptídios. Estudos com ésteres metílicos são uma alternativa à pouca solubilidade destes compostos, que possuem estrutura bipolar zwitteriônica no estado sólido e em meio polar, em solventes orgânicos. Neste trabalho, propomos a síntese e estudo do éster metílico da prolina, por meio de cálculos teóricos em conjunto com dados experimentais. A síntese foi realizada a partir da esterificação do aminoácido pela reação com cloreto de tionila e metanol. Obtivemos curvas de PES para as suas estruturas iniciais com o anel em *endo* e *exo* ao grupo carbonílico, sendo energeticamente favorecidos apenas os conformeros com anel *endo*. Foram feitos cálculos de energia e frequência para essas conformações, com correção de ZPE em nível (DFT)B3LYP e MP2, aug-cc-pVDZ. Estes dados foram comparados com dados experimentais. A deconvolução da banda fundamental do IV da carbonila indica o equilíbrio entre duas populações de rotâmeros. A não variação na constante de acoplamento $^3J_{HH}$ indica que essas populações não variam com a polaridade do solvente.

Análise conformacional de aminoácidos - Cálculos teóricos - RMN