



E0476

### **ANÁLISE CONFORMACIONAL DO ÉSTER METÍLICO DA ALANINA POR ESPECTROSCOPIA DE RMN, INFRAVERMELHO E CÁLCULOS TEÓRICOS**

Aline Armelin Macedo (Bolsista CNPq), Carina R. Martins e Professor Roberto Rittner Neto (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O estudo conformacional de aminoácidos são de grande interesse devido a sua importância biológica. Eles exibem estrutura bipolar zwitteriônica no estado sólido e em meio polar, resultando em baixa solubilidade em solventes orgânicos. Assim foi proposto o estudo do éster metílico do aminoácido, no caso a alanina, por cálculos teóricos e dados experimentais. Foi determinada a sua PES, em nível B3LYP/cc-pVDZ, que forneceu as suas conformações mais estáveis, que foram otimizadas, em nível B3LYP/aug-cc-pVDZ. Para a obtenção dos dados experimentais, efetuou-se a síntese do éster através da reação da alanina com cloreto de tionila e posterior esterificação com metanol. O éster foi caracterizado pelos seus espectros de RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  e de infravermelho, o qual mostrou apenas uma banda na região fundamental do estiramento  $\text{C}=\text{O}$ , indicando a presença de apenas um conformero em concordância com os cálculos teóricos. A não variação da constante de acoplamento  $^3J_{\text{HH}}$  nos espectros de RMN em vários solventes, indicou também que o seu equilíbrio conformacional não varia com a polaridade do meio.

Análise conformacional - Aminoácidos - Cálculos teóricos