



E447

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

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

O comportamento conformacional de moléculas orgânicas é uma das questões mais importantes no estudo das estruturas moleculares. Aminoácidos naturais são de interesse especial, pois sua estrutura e mobilidade conformacional determinam a variedade e a especificidade funcional das proteínas e polipeptídios. Aminoácidos exibem uma estrutura bipolar zwitteriônica no estado sólido e em meio polar. Devido a este comportamento, estudos da sua estabilidade conformacional em solventes orgânicos são pouco explorados. Para contornar este problema foi proposto o estudo do éster metílico do aminoácido, no caso a glicina, por meio de cálculos teóricos em conjunto com dados experimentais. A partir de uma curva de PES, em nível B3LYP/cc-pVDZ foram obtidas as conformações mais estáveis e feitos cálculos de energia e frequência com a correção do ZPE em nível B3LYP/aug-cc-pVDZ. Estes dados foram comparados com os resultados experimentais. O éster metílico da glicina foi obtido a partir da esterificação do aminoácido pela reação com cloreto de tionila e metanol. O composto foi caracterizado por RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ , e seu espectro de infravermelho forneceu dados que possibilitou a verificação da variação das populações dos conformeros de acordo com a variação da polaridade do meio.

Análise conformacional - Aminoácidos - Cálculos teóricos