

Mapa conformacional Ab initio para Isomaltose em fase gasosa

Fábio Javaroni^{a,*} (PG), Clarissa O. da Silva^a (PQ)

^aDepartamento de Química da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, BR-465, Km 47, Seropédica, Rio de Janeiro CEP 23.890-000, Brasil

*e-mail: javaroni@openlink.com.br

Isomaltose, mapa conformacional, dissacarídeos

Introdução

O mapa conformacional ab initio para a β -isomaltose (figura 1) na orientação TG ($\Omega=180^\circ$) em fase gasosa foi construído utilizando cálculos tipo HF/6-31G(d,p).

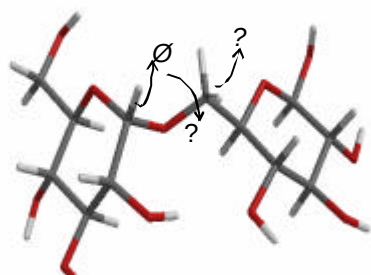


Figura 1. β -isomaltose. A ligação glicosídica é definida pelos valores dos ângulos diedros ϕ , ψ e ω .

Este estudo busca obter as estruturas mais abundantes para este composto. O mapa conformacional (figura 2) foi obtido variando-se, em intervalos de 30° , os ângulos Φ e Ψ , para um mesmo valor de $\Omega=180^\circ$.

Resultados e Discussão

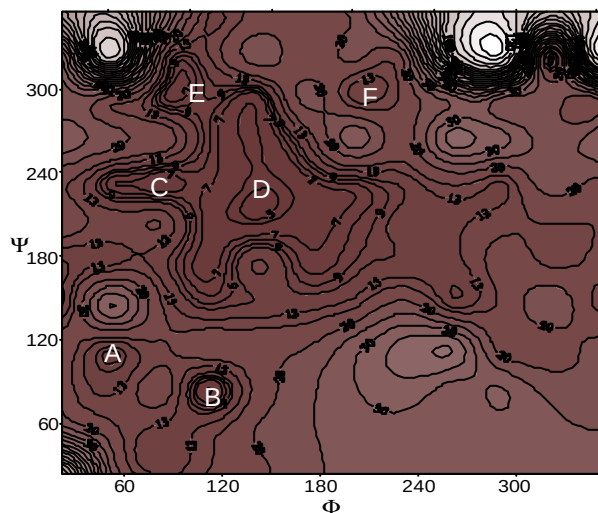


Figura 2. Mapa conformacional calculado para a β -isomaltose, orientação TG, a nível HF/6-31G(d,p) (144 pontos). Os valores de energia estão em Kcal/mol.

Na Figura 2, reportamos o mapa conformacional construído a partir da interpolação dos 144 pontos calculados.

A partir do mapa conformacional, podemos observar a presença de seis regiões de estabilidade,

identificadas na figura como A, B, C, D, E, F. Os valores de Φ e Ψ , que conferem a este sistema tal estabilidade, são melhor identificados na tabela 1.

Tabela 1. Seis regiões de mínimos de energia no mapa conformacional da isomaltose.

Φ C1-O1-C6'	O5- Ψ O1-C6'-C5'	C1- Ψ O1-C6'-C5'-O5'	Região
50	115	180	A
110	85	180	B
80	235	180	C
140	235	180	D
110	295	180	E
200	295	180	F

Conclusões

Muitos mínimos conformacionais foram encontrados para a isomaltose, o que sugere uma grande flexibilidade para este açúcar. Este resultado está de acordo com a natureza da ligação $\alpha(1,6)$, que une as duas unidades monossacarídicas.

Os mapas conformacionais para os outros valores de Ω : 60° e -60° estão sendo obtidos, bem como a validação das estruturas.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Capes, FAPERJ e CNPq pelo apoio financeiro a este trabalho.

Referências:

- ¹ da Silva, C. O.; Nascimento, M. A. C. Carbohydr. Res. **2004**, 339, 113-122.
- ² Best, R. B.; Jackson G. E. e Naidoo K. J. J. Phys.Chem. **2001**, 105, 4742-4751.