

## Modelagem molecular de poli-aminofenóis voltados para biossensores

Odonírio Abrahão Júnior<sup>1</sup> (PQ)\*, Thiago S. P. Teixeira<sup>1</sup> (IC), João Marcos Madurro<sup>2</sup> (PQ), Ana Graci Brito Madurro<sup>3</sup> (PQ) e Antônio Eduardo da Hora Machado<sup>2</sup> (PQ). \*odonirio@biomedicina.ufmt.edu.br.

1. Departamento de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Pç. Manoel terra, 330, Bairro Abadia, Uberaba - MG.

2. Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia, campus Santa Mônica, Uberlândia – MG.

3. Instituto de Genética e Bioquímica, Universidade Federal de Uberlândia, campus Umuarama, Uberlândia – MG.

**Palavras Chave:** análise conformacional, biossensores, modelagem molecular, poli-aminofenóis, RM1.

### Introdução

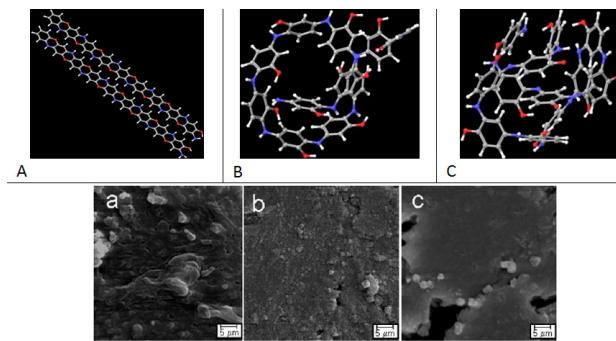
Polímeros derivados de aminofenóis [poli(2-aminofenol), poli(3-aminofenol) e poli(4-aminofenol)], respectivamente P2AF, P3AF e P4AF, estão sendo estudados para produção de eletrodos modificados com aplicações no desenvolvimento de biossensores<sup>1,2</sup>. Este trabalho apresenta modelos teóricos destes sistemas moleculares, de forma a construir uma base teórica e experimental consistente para o estudo da relação estrutura-propriedade destes polímeros.

A partir do estudo dos mecanismos de eletropolimerização de aminofenóis<sup>3-5</sup> modelos dos polímeros P2AF, P3AF e P4AF foram desenhados e submetidos à análise conformacional com o campo de força AMBER<sup>6</sup>, devidamente parametrizado para estas moléculas, no pacote de programas Macromodel<sup>7</sup>. Para isto utilizou-se o método de Monte Carlo com um modelo de solvatação contínua de água<sup>7</sup>. As estruturas de mínima energia foram otimizadas com o método semi-empírico RM1<sup>8</sup> no MOPAC<sup>9</sup> e com B3LYP/6-31G(d) no Gaussian03<sup>10</sup>, onde se incluiu o cálculo de freqüências e modelos de solvatação.

### Resultados e Discussão

As cadeias poliméricas previstas se estabilizam a partir de sete a nove monômeros. Um cluster com duas cadeias de nonâmeros foi estabelecido como modelo de P2AF, enquanto que dodecâmeros foram escolhidos como modelos de P3AF e P4AF, baseado na reprodução de dados experimentais.

A figura 1 mostra os modelos obtidos e as micrografias eletrônicas de varredura dos polímeros. P3AF e P4AF apresentam estruturas moleculares globulares e formam grumos. P3AF (Fig. 1b) apresenta cavidade molecular, em conformidade com a proposta de Sankarapapavinasam<sup>11</sup>. P2AF possui ligações de hidrogênio N-H···O fortes, que estabilizam a conformação linear. Seus orbitais de fronteira demonstram suas propriedades semicondutoras. O mesmo não foi observado em P3AF e P4AF. A tabela 1 apresenta excelente correlação entre as freqüências vibracionais teóricas e experimentais.



**D** Figura 1. Estruturas moleculares de modelos dos polímeros (A)P2AF, (B) P3AF, (C) P4AF e respectivas micrografias eletrônicas de varredura.

Tabela 1. Freq. vibracionais: RM1 / experimentais (cm<sup>-1</sup>)

Poli-2-AF <sup>12,13</sup>	Poli-3-AF <sup>2</sup>	Poli-4-AF <sup>5</sup>
O-H	-	3205, 3303 / 3429
N-H	3272, 3326 / 3449	3305, 3360 / 3237
C-H	1161 / 1160	3140, 3205 / 3024
C-C	1239, 1634 / 1384, 1633	1423, 1618 / 1424-1622
C-O	1337 / 1218	1237 / 1237
C-N	1650, 1613 / 1652	1655 / 1655

### Conclusões

Modelos moleculares de poliaminofenóis foram obtidos com boa correlação experimental. Estas estruturas serão utilizadas no estudo de interações com biomoléculas, de forma a contribuir com o desenvolvimento e aplicação de biossensores eletroquímicos.

### Agradecimentos

FAPEMIG, FUNEPU, CNPq, Nanobrax.

<sup>1</sup> Franco, D. L.; et al. *Pol. Eng. Sci.* **2008**, 48, 2043.

<sup>2</sup> Franco, D. L.; et al. *Mat. Chem. Phys.* **2008**, 107, 404.

<sup>3</sup> Tucceri, R. I.; et al. *Eletrochim. Acta* **1997**, 42, 919.

<sup>4</sup> Adhikari, B.; et al. *Mat. Chem. Phys.* **2008**, 111, 59.

<sup>5</sup> Sun, C.; et al. *J. Macromol. Sci., A* **2008**, 45, 972.

<sup>6</sup> Cornell, W. D.; et al. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, 117, 5179.

<sup>7</sup> MacroModel, version 9.6, Schrodinger, LLC, New York, NY, 2005.

<sup>8</sup> Simas, A. M.; et al. *J. Comp. Chem.* **2006**, 27, 1101.

<sup>9</sup> Mopac2007, Stewart, J. J. P., Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, CO, USA, <http://OpenMOPAC.net> (2007).

<sup>10</sup> Frisch, M. J.; et al. Gaussian 03, Revision D.1, Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2005.

<sup>11</sup> Sankarapapavinasam, S.; *Synth. Met.* **1993**, 58, 173.

<sup>12</sup> Sereno, L.; et al. *J. Electroanal. Chem.* **1989**, 263, 333.

<sup>13</sup> Morallón, E.; et al. *J. Electroanal. Chem.* **2005**, 576, 139.