

Confôrmers do Éster Etilico da L- Fenilalanina

Carolyne Brustolin Braga¹(IC), Larissa Sens¹(IC), Leandro Scorsin¹(IC), Barbara Celânia Fiorin^{1*}(PQ), Roberto Rittner²(PQ)

¹Universidade Estadual de Ponta Grossa - UEPG, Departamento de Química. Av. General Carlos Cavalcanti, 4748, Uvaranas, Ponta Grossa- PR,²UNICAMP, Instituto de Química, Campinas-SP, * bcfiorin@uepg.br

Palavras Chave: Análise Conformacional, Cálculos Teóricos, Fenilalanina.

Introdução

A fenilalanina (Phe), um aminoácido essencial, está diretamente relacionada com a produção de tirosina, precursora da epinefrina (adrenalina), a qual estimula a função cerebral [1].

A fenilcetonúria (PKU) é uma doença causada pelo defeito nos genes que codificam a enzima fenilalanina hidroxilase. Este defeito genético reduz ou anula a capacidade do organismo de converter a fenilalanina em tirosina. O acúmulo anormal de fenilalanina no sangue é responsável por graves conseqüências ao sistema nervoso central, como falhas ao andar e falar, hiperatividade, tremor, microcefalia, falhas no crescimento e retardo mental [2].

Como nos dipeptídeos encontramos o resíduo da fenilalanina na forma de éster, investigaremos o isomerismo rotacional do éster etílico da L-fenilalanina (EEPhe) demonstrado na Figura 1, empregando cálculos teóricos.

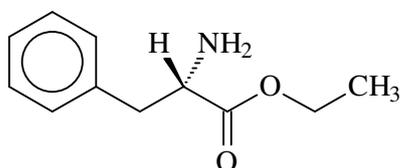


Figura 1. Éster etílico da L-fenilalanina (EEPhe)

Resultados e Discussão

O equilíbrio conformacional do EEPhe foi avaliado com o emprego de cálculos teóricos. Primeiramente foram executados cálculos de *scans* com os ângulos diedros N-C-C-C e H-N-C-C(O), isoladamente e nesta ordem. Neste cálculo, um gráfico de energia versus ângulo diedro foi obtido, em seguida foi possível observar quais as prováveis estruturas mais estáveis envolvidas no equilíbrio. Para o EEPhe foram encontradas dez geometrias, as quais foram submetidas a cálculos de otimização e frequência.

Ao final destes cálculos foram obtidas as populações referentes a cada uma das geometrias, sendo que cinco delas apresentaram população superior a 10% e uma alcançou 37,38%, sendo a majoritária. Estes dados estão apresentados detalhadamente na Tabela 1.

Tabela 1. Energias relativas, populações e momento de dipolo dos confôrmers do EEPhe.

Confôrmers	ΔE_{rel}	Popul. (%)	μ (D)
1	0,00	37,38	1,82
2	0,61	13,26	1,99
3	0,69	11,58	2,18
4	0,73	10,90	2,02
5	0,75	10,51	2,08

As demais estruturas representaram menos que 17% do equilíbrio.

O confôrmers majoritário está mostrado na Figura 2. De todas as geometrias analisadas o isômero 1 foi o único que apresentou os hidrogênios do grupo NH₂ direcionados para o oxigênio da carbonila, o que sugere ligações de hidrogênio intramoleculares, tal efeito confere maior estabilidade para esta geometria.

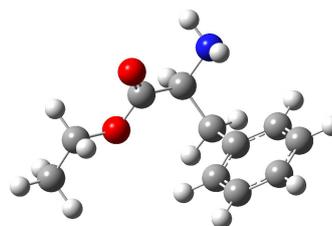


Figura 2. Confôrmers 1 do EEPhe.

Conclusões

O equilíbrio conformacional do EEPhe apresenta dez geometrias, entretanto metade delas representa quase 84% da população total, sendo o confôrmers 1 o majoritário com 37,38%.

Agradecimentos

Fundação Araucária FAPESP

¹ CAMPBELL, M.K.; FARREL, S.O. *Bioquímica*. 5ªed., São Paulo: Thomson Learning, 2007.

² DEVLIN, T.M.. *Manual de Bioquímica com correlações clínicas*. 1ªed., São Paulo: Editora Edgard Blucher LTDA, 2003. Tradução Da 5ªed. Americana.