

# Estudos Comparativos dos Espectros Vibracionais Experimentais e Teóricos da Treonina com Variação do pH

Stefane Nunes Costa<sup>1\*</sup> (IC), José R. C. Júnior<sup>2</sup> (PG), Francisco Adilson M. Sales<sup>3</sup> (PG),  
Pedro de Lima Neto<sup>2</sup> (PQ), Valder N. Freire<sup>3</sup> (PQ)  
\*stefanenunescosta@gmail.com

<sup>1</sup>Departamento de Química Orgânica e Inorgânica, UFC, , Campus do Pici, 60455-960 Fortaleza,CE

<sup>2</sup>Departamento de Físico-Química e Química Analítica, UFC, Campus do Pici, 60455-960 Fortaleza,CE

<sup>3</sup>Departamento de Física, UFC, Campus do Pici, 60455-960 Fortaleza, CE

Palavras Chave: Treonina, DFT e infravermelho.

## Introdução

A treonina é um aminoácido essencial que não é biosintetizado no organismo animal. Em solução aquosa, uma grande variedade de estados de cargas está presente na treonina, sendo estes dependentes do pH da solução<sup>1,2</sup>. Este fato abre a possibilidade de se estudar as propriedades vibracionais desses aminoácidos com a variação do pH em meio aquoso. As mudanças vibracionais observadas nos espectros podem ser comparadas com os diferentes conformêros calculados por métodos teóricos no vácuo e com água implícita.

## Resultados e Discussão

Para a preparação das soluções da treonina foram escolhidos os pH's 0,5, 5,5 e 12,0, que apresentam uma maior quantidade das espécies nos estados protonados no equilíbrio, que são  $H_2Tre^{1+}$ ,  $HTre^0$  e  $Tre^{1-}$ , respectivamente. Os cálculos teóricos foram realizados através da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) com o funcional híbrido M06-2X e base 6-311+G(d,p), utilizando programa Gaussian09 no vácuo e em solução aquosa utilizando o modelo contínuo de solvatação (PCM, *Polarizable Continuum Model*)<sup>3</sup>. Os resultados teóricos mostraram que a forma zwitteriônica não é estável no vácuo, convertendo-se na forma neutra durante a otimização da geometria. Foram encontradas duas conformações de energia próximas para a forma neutra utilizando o PCM. A Figura 1 apresenta os conformêros de mais baixa energia.

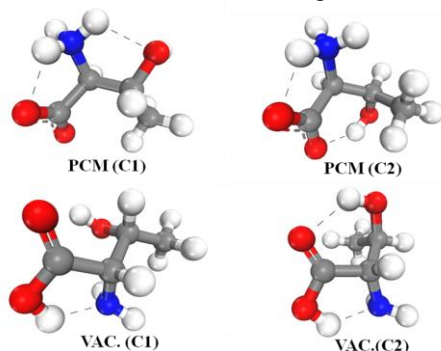


Figura 1. Conformêros da treonina.

As medidas espectroscópicas em solução da treonina no pH 5,5 são comparadas aos cálculos DFT na Figura 2.

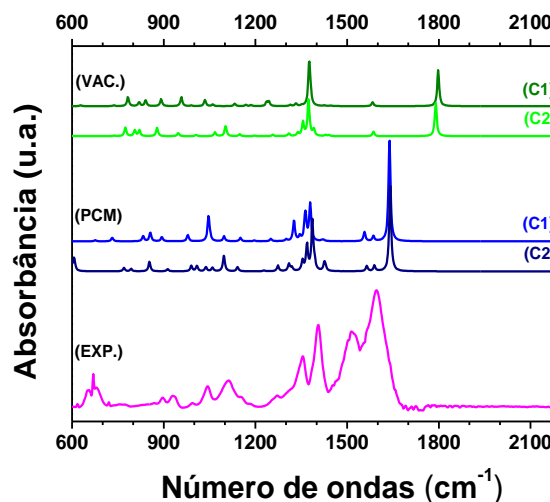


Figura 2. Espectros IR da treonina, pH 5,5, e faixa 600-2000  $cm^{-1}$ : experimental (rosa), em solução aquosa PCM (azul) e vácuo (verde).

No pH 0,5 o estiramento da carbonila se encontra em torno de  $1735\text{ cm}^{-1}$ . Observa-se que o aumento do pH para 5,5 favorece o deslocamento desse estiramento para  $1594\text{ cm}^{-1}$  devido ao enfraquecimento da ligação C=O, que ocorre pela desprotonação do grupo OH do ácido carboxílico. Por outro lado, a ligação C-O, que se apresenta em torno de  $1249\text{ cm}^{-1}$  para o pH 0,5, desloca-se para maior número de onda quando se aumenta o pH da solução, o que ocorre devido ao fortalecimento da ligação C-O.

## Conclusões

As mudanças observadas nos espectros vibracionais experimentais nos diferentes pH's, são razoavelmente explicadas pelos cálculos teóricos, obtendo-se melhor concordância no caso do modelo contínuo de solvatação (PCM). Uma melhor explicação do IR poderá ser obtida considerando explicitamente uma grande quantidade de moléculas de água interagindo explicitamente com a treonina.

## Agradecimentos

Agradecimento ao CNPq pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> Gordon, M. L., et al., *J. Phys. Chem. A*, **2003**, *107*, 6144.

<sup>2</sup> Wolpert, M. e Hellwig, P., *Spec. Acta*, **2006**, *67*, 987-1001

<sup>3</sup>Dobrowolski, J. C. Z., et al., *J. TEOCHEM*, **2007**, *129*, 810.