

Investigação Teórica da alanina em fases aquosa e gasosa utilizando a QTAIM.

Aline F. Bezerra¹ (PG)*, Jefferson José Soares da Silva¹ (PG), Arquimedes Mariano Pereira¹ (PG), Henrique Caldas Chame¹ (PG), Kelson Carvalho Lopes¹ (PQ), Regiane C.M.U. Araújo¹ (PQ)

¹ Universidade Federal da Paraíba; *alineafb@yahoo.com.br

Palavras Chave: Química Teórica, QTAIM, Densidade Eletrônica.

Introdução

Os aminoácidos contêm tanto um grupo básico (-NH₂), quanto um grupo ácido (-CO₂H). No estado cristalino os aminoácidos existem na forma de íons dipolares (também chamados de *zwitterions*), na qual, tanto o grupo carboxila, quanto o grupo amino estão presentes na forma de íons, carboxilato (-CO₂⁻) e amino (-NH₃⁺)^[1]. Aminoácidos apolares e alifáticos como a alanina, por exemplo, estabilizam a estrutura da proteína por meio de interações hidrofóbicas. De acordo com estudos realizados por Császár^[2,3] as ligações de hidrogênio intramoleculares contribuem como o maior efeito de estabilização dos confôrmeros de menor energia, tanto da glicina, quanto da alanina. As mudanças conformacionais que podem existir nos aminoácidos são acompanhadas por diversas mudanças energéticas. Nesse contexto este trabalho se faz importante para elucidar de forma clara as mudanças conformacionais, energéticas e estruturais que ocorrem na alanina, tanto em fase gasosa, quanto em fase aquosa, utilizando métodos da Química Quântica e também a Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (QTAIM)^[4].

Resultados e Discussão

Todos os cálculos foram realizados no programa Gaussian 09W^[5] utilizando os métodos DFT^[6,7], com o funcional híbrido B3LYP^[8,9], e o método MP2^[10] ambos com o conjunto de base de Pople 6-311++G(d,p)^[11]. Para este trabalho realizamos rotações até 360°, com incrementos de 10° nos ângulos diedrais da alanina, da maneira como pode ser vista na Figura 1A. Foi possível verificar que ambos os métodos concordaram no que diz respeito às conformações de mínimo de energia obtidas através dos cálculos, conforme visto na figura 1B e 1C.

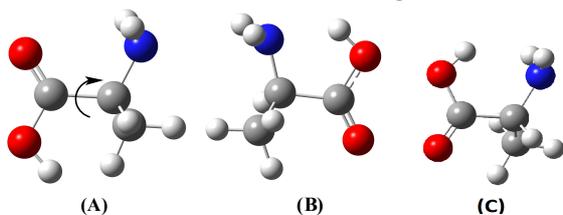


Figura 1. (A) Rotação realizada na alanina; (B) Conformação de mínimo de energia obtida por ambos os métodos utilizados em fase gasosa; (C) Conformação de

mínimo de energia obtida por ambos os métodos em fase aquosa.

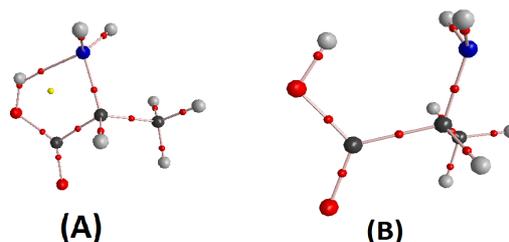


Figura 2. (A) Interação intramolecular na alanina em fase gasosa; (B) alanina em fase aquosa sem a presença da interação intramolecular.

Através da conformação de mínimo foi possível analisar topologicamente a densidade eletrônica através da QTAIM e verificar a formação de uma interação intramolecular em fase gasosa, no entanto, não há formação desta interação na conformação de mínimo obtida em fase aquosa. Esse comportamento pôde ser visto na Figura 2A e 2B.

Conclusões

Pode-se perceber uma mudança significativa no comportamento da alanina com a inclusão do solvente. A formação da interação intramolecular em fase gasosa, caracterizada através da QTAIM, estabiliza esta conformação em relação à conformação obtida em fase aquosa.

Agradecimentos

UFPB, CNPq, CAPES.

Solomons, T.W.G; Fryhle, C.B.; Organic Chemistry, 8th ed. John Wiley & Sons, Inc.

² Császár, A.G.; J. Am. Chem. Soc. 114 (1992) 9568.

³ Császár, A.G.; J. Phys. Chem. 100 (1996) 3541.

⁴ Bader, R.F.W.; Atoms in Molecules. A Quantum Theory, Clarendon Press: Oxford, 1990.

⁵ GAUSSIAN 09, Revision A.1., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

⁶ Hohenberg, P.; Kohn, W.; Phys. Rev. B. 136 (1964) 864.

⁷ Kohn, W.; Sham, L.; Phys. Rev. A. 140 (1965) 1133.

⁸ Becke A.D., Phys. Rev. A, 38 (1988) 3098.

⁹ Lee C., Yang W., Parr R.G., Phys. Rev. B, 37 (1988) 785.

¹⁰ Møller, C., and Plesset, M.S., Note on the approximation treatment for many-electron systems, Phys. Rev., 46, 618–622 (1934).

¹¹ Hariharan, P.C., and Pople, J.A., Influence of polarization functions on MO hydrogenation energies, Theor. Chim. Acta, 28, 213–222 (1973).