

## R-31 Obtenção dos confôrmeros mais estáveis da isomaltose

Fábio Javaroni\*, Clarissa O. da Silva

Departamento de Química – ICE, UFRuralRJ, Rodovia BR 465, km 47, Seropédica, Rio de Janeiro 23890-000

Palavras-chave: isomaltose, mapa conformacional, constante de acoplamento de spin

Neste trabalho nosso objetivo é obter os confôrmeros mais estáveis da isomaltose em solução aquosa, considerando a enorme flexibilidade da ligação glicosídica do tipo  $\alpha 1,6$  presente neste dissacarídeo. Dependendo da orientação relativa dos dois anéis de glicose (Figura 1), definida pelo valor dos ângulos diedros  $\Phi$ ,  $\Psi$  e  $\Omega$ , diferentes estruturas podem ser obtidas. Nosso interesse é desenvolver um protocolo que utiliza métodos *ab initio* para selecionar<sup>1</sup> aquelas mais estáveis em solução aquosa, e em seguida validá-las, calculando para o conjunto obtido uma propriedade facilmente mensurável experimentalmente – a constante de acoplamento de spin  $^3J_{C,H}$ . Este protocolo se baseia na construção de mapas conformacionais HF/6-31G(d,p) obtidos a partir de uma varredura nos ângulos  $\Phi$  e  $\Psi$ , pois o ângulo  $\Omega$  pode assumir basicamente 3 valores<sup>2</sup>. O mapa da conformação TG é reportado abaixo, onde as regiões de menor energia são evidenciadas (Figura 2). A partir destes mapas, 20 estruturas com população significativa em  $T=298,15K$  foram selecionadas, após a inclusão do efeito do solvente. O valor da constante  $^3J_{C,H}$  encontrado para este conjunto foi de 3,43.

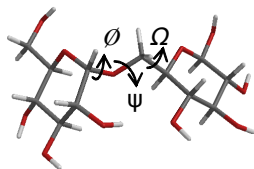


Figura 1. Isomaltose

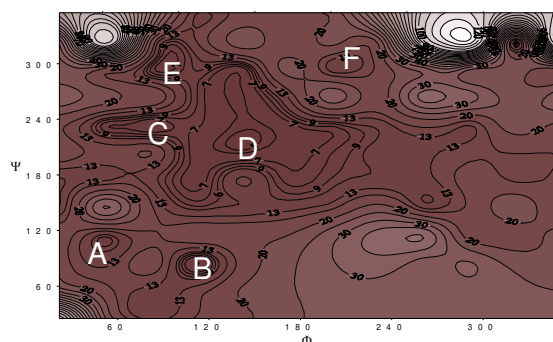


Figura 2. mapa conformacional (configuração TG)

<sup>1</sup> da Silva, C. O.; Nascimento, M. A. C. *Carbohydr. Res.* **2004**, 339, 113-122.

<sup>2</sup> Best, R. B.; Jackson G. E. e Naidoo K. J. *J. Phys.Chem.* **2001**, 105, 4742-4751.