

## Investigação das conformações mais estáveis da molécula de $\beta$ -naftilxilose

Paula do Nascimento Goulart<sup>a</sup> (PG), Clarissa Oliveira da Silva<sup>b</sup> (PQ)

<sup>a,b</sup> Dep. De Química – ICE Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro Rodovia BR 465

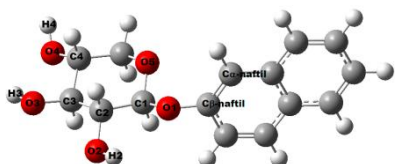
Keywords:  $\beta$ -naftil-xilose, *confômeros*, DFT, cálculos de estrutura eletrônica, microsolvatação.

### INTRODUÇÃO

Xiloses simples substituídas com agliconas hidrofóbicas podem funcionar como iniciadores para a síntese de compostos que recobrem externamente as células tumorais (GAGs).<sup>1</sup> A porção hidrofóbica interfere seletivamente na via biossintética dos GAGs.

### METODOLOGIA

Foi realizado um estudo conformacional da  $\beta$ -naftilxilose (figura 1) utilizando a Teoria do Funcional Densidade (B3LYP) com conjuntos de funções de base 6-31G+(d,p)<sup>2</sup> e 6-311++G(2d,2p)<sup>2</sup>. Para os cálculos em solução metanólica, utilizamos também o modelo PCM (modelo do contínuo polarizável). Investigou-se conformações provenientes da rotação de cada ligação C-O, variando-se o ângulo diedro que define a posição de cada grupo hidroxila, e também variando-se o diedro que define a posição do anel naftil. Sobre o diedro C1-O1-C $\beta$ -C $\alpha$  (diedro  $\varphi_{\text{naftil}}$ ) foi realizada uma varredura para construção da superfície de energia potencial.

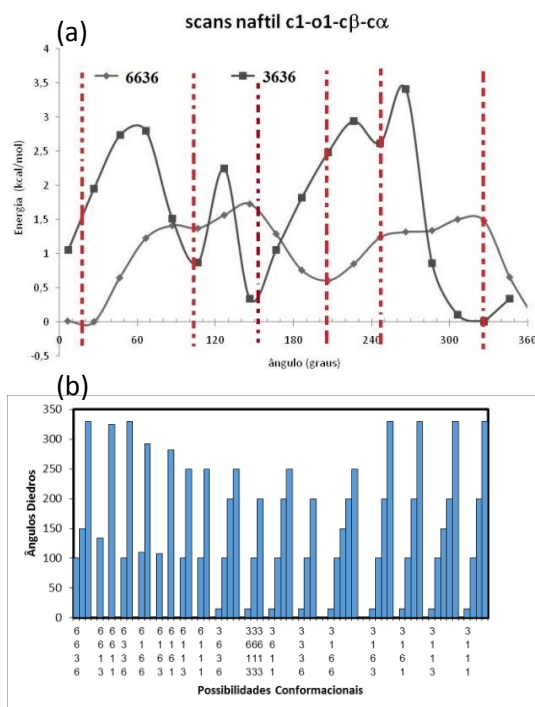


**Figura 1-** Molécula de  $\beta$ -naftilxilose.

### RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após a otimização geométrica de todas as 81 possibilidades conformacionais para esta molécula em fase gasosa, foram obtidas 20 conformações. As 12 conformações mais estáveis foram utilizadas na investigação das 6 posições relativas encontradas para o grupo naftil, a partir do estudo realizado (figura 2a). Combinando essas informações, 72 estruturas tiveram a geometria otimizada (figura 2b) e aquelas mais estáveis foram solvatadas.

Após o cálculo de frequência e de rotação específica, os resultados obtidos para os 19 confômeros mais estáveis fornecem um valor da rotação específica para a  $\beta$ -naftilxilose de  $-70,12^\circ/\text{dm}(\text{g}/\text{cm}^3)$ .



**Figura 2-** varreduras nos confômeros 3636 e 6636(a). E “mapa” com os confômeros estáveis encontrados(b).

### CONCLUSÕES

O valor da rotação específica obtido nesse estudo para a molécula de  $\beta$ -naftilxilose ( $-70,12^\circ/\text{dm}(\text{g}/\text{cm}^3)$ ) não apresentou boa correspondência com o valor da propriedade obtido experimentalmente ( $-32^\circ/\text{dm}(\text{g}/\text{cm}^3)$ ).<sup>3</sup> São introduzidas moléculas de solvente (MeOH) explícitas, para investigar se a consideração de interações específicas soluto-solvente influenciam significativamente no valor da propriedade considerada.

<sup>1</sup> ANNA SIEGBAHN, ULRICA Aili, AGATA OCHOCINSKA, MARTIN, JERK RÖNNOLS, KATRIN MANI, GÖRAN WIDMARM, ULF ELLERVIK. *Bioorganic & Medicinal Chemistry* 19 (2011) 4114–4126.

<sup>2</sup> CSONKA, G.I. Proper basis set for quantum mechanical studies of potential energy surfaces of carbohydrates. *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 2002, 584, 1-4; CSONKA, G.I., FRENCH, A.D., JOHNSON, G. P., STORTZ, C. A. J. *Chem. Theory Comp.*, 2009, 5, 679-692

<sup>3</sup> Comunicação pessoal com Göran Widmarm.