

Plano para tese de mestrado

Área:

Química Supramolecular

Título:

Reconhecimento molecular de aminoácidos por receptores macrobíclicos heteroditópicos.

Objectivos:

Desenvolvimento de novos receptores macrobíclicos heteroditópicos, conjugando sítios de ligação adequados a grupos carboxilo e a grupos amónio com fragmentos estruturais rígidos de modo a criar moléculas com cavidades adequadas para o reconhecimento de aminoácidos.

A afinidade entre o receptor e o substrato será avaliada através da determinação das constantes de associação recorrendo a várias técnicas analíticas e espectroscópicas e a caracterização no estado sólido das supermoléculas será efectuada por difracção de raios-X de cristal único.

O conhecimento detalhado da estrutura e propriedades termodinâmicas das supermoléculas formadas servirá de base para a selecção de sistemas que possam ser desenvolvidos como sensores para a detecção e doseamento dos aminoácidos.

Interesse científico:

Na Natureza os aminoácidos são utilizados como peças fundamentais para a construção de proteínas e como mensageiros moleculares capazes de transmitir informação nos organismos vivos. Assim, o reconhecimento molecular de aminoácidos por receptores sintéticos possui especial interesse, tendo como potenciais aplicações o desenvolvimento de métodos eficientes de detecção e quantificação de aminoácidos, purificação e resolução de racematos e a extensão do conhecimento fundamental adquirido ao reconhecimento molecular em sistemas biológicos.

Plano de trabalhos:

Síntese de novos receptores macrobíclicos heteroditópicos.

Caracterização dos receptores sintetizados recorrendo a técnicas analíticas correntes, nomeadamente ponto de fusão, espectroscopia de infravermelho, análise elementar, espectrometria de massa e RMN (^1H , ^{13}C , HMQC, COSY e NOESY).

Determinação das constantes de associação entre o receptor e os aminoácidos em solução por potenciometria, UV-vis e/ou ^1H RMN.

Caracterização das supermoléculas em solução e no estado sólido recorrendo a várias técnicas espectroscópicas, nomeadamente RMN, espectrometria de massa e difracção de raios-X de cristal único.

Local de trabalho:

Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Universidade Nova de Lisboa. Av. da República – EAN, 2780-157 Oeiras, Portugal

Responsável:

Prof. Rita Delgado, Laboratório de Química de Coordenação e Supramolecular, delgado@itqb.unl.pt

Período de trabalho:

De acordo com o estipulado nas normas de mestrado.