

RESUMO

Gularte, Matheus da Silva. **Diferenças estruturais e conformacionais entre configurações helicoidais e folhas- β em estruturas orgânicas de peptídeos ligados por hidrogênio.** 2024. 15 f. Seminários II – Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2024.

Nos últimos anos, os arcabouços metais-orgânicos (MOFs) e arcabouços orgânicos covalentes (COFs) têm trazido complexidade aos materiais porosos com ligantes orgânicos ajustáveis. Diferente dos MOFs e COFs que utilizam ligações fortes, os arcabouços porosos ligados por hidrogênio (HPFs) dependem de interações não covalentes para formar redes porosas. Os HPFs convencionais têm limitações como aquiralidade e dificuldade de síntese, enquanto os arcabouços peptídicos ligados por hidrogênio (P-HPFs) oferecem vantagens como quiralidade, modularidade e biocompatibilidade. Os P-HPFs utilizam interações não covalentes para formar redes cristalinas porosas, oferecendo biocompatibilidade e modularidade. Eles podem criar microambientes adaptados, semelhantes às proteínas naturais, que facilitam funções como catálise. Peptídeos são sequências de aminoácidos que se auto-organizam impulsionados por forças hidrofóbicas e ligações de hidrogênio intermoleculares, influenciadas pela sequência de aminoácidos. Peptídeos helicoidais, como hélices α e hélices 3_{10} , formam estruturas estáveis e funcionais, com potencial para biomedicina e catálise. Estudos revelaram que esses peptídeos podem criar nanocanais ajustáveis, encapsular moléculas e coordenar íons metálicos, imitando enzimas naturais. A adaptação dos poros através da modificação das cadeias laterais destaca a versatilidade desses materiais. Peptídeos em folha- β formam estruturas estáveis e extensas, sendo úteis para desenvolver materiais avançados. Eles podem formar nanotubos de parede dupla, comparáveis a estruturas biomoleculares. A co-montagem de peptídeos enantioméricos pode ser mais favorável do que a auto-montagem, oferecendo insights valiosos para o design de novos biomateriais e compreensão da agregação amiloide. As estruturas helicoidais e de folha- β dos P-HPFs demonstram grande potencial na fabricação de materiais avançados. A habilidade de controlar a auto-organização e funcionalização dessas estruturas abre diversas possibilidades na biotecnologia e outras áreas.

ABSTRACT

Gularte, Matheus da Silva. **Structural and conformational differences between helical and β -sheet configurations in hydrogen-bonded organic peptide structures**. 2024. 15 pages. Seminars II – Graduate Program in Chemistry, Federal University of Pelotas, Pelotas, 2024.

In recent years, metal-organic frameworks (MOFs) and covalent organic frameworks (COFs) have brought complexity to porous materials with tunable organic ligands. Unlike MOFs and COFs that use strong bonds, hydrogen-bonded porous frameworks (HPFs) rely on non-covalent interactions to form porous networks. Conventional HPFs have limitations such as achirality and synthesis difficulty, while peptide-based hydrogen-bonded frameworks (P-HPFs) offer advantages such as chirality, modularity, and biocompatibility. P-HPFs use non-covalent interactions to form porous crystalline networks, offering biocompatibility and modularity. They can create tailored microenvironments similar to natural proteins, facilitating functions such as catalysis. Peptides are sequences of amino acids that self-organize driven by hydrophobic forces and intermolecular hydrogen bonds, influenced by the amino acid sequence. Helical peptides, such as α -helices and 3_{10} helices, form stable and functional structures, with potential for biomedicine and catalysis. Studies have shown that these peptides can create tunable nanochannels, encapsulate molecules, and coordinate metal ions, mimicking natural enzymes. The adaptation of pores through the modification of side chains highlights the versatility of these materials. β -sheet peptides form stable and extensive structures, being useful for developing advanced materials. They can form double-walled nanotubes comparable to biomolecular structures. The co-assembly of enantiomeric peptides may be more favorable than self-assembly, offering valuable insights for the design of new biomaterials and understanding amyloid aggregation. The helical and β -sheet structures of P-HPFs demonstrate great potential in the fabrication of advanced materials. The ability to control the self-organization and functionalization of these structures opens up various possibilities in biotechnology and other fields.