

Case Study 2

Unidade Curricular: Bioquímica



Discentes:

2674 Miguel Cisneiros

2675 Daniel Marçal

2691 Marcelo Pereira

2814 Bernardo Augusto

Docente: Marta Justino

Índice

Estrutura Primária do péptido.....	3
Previsão da estrutura secundária	3
Estrutura Terciária.....	4
Estrutura Quaternária	5
Comportamento ácido-base	6
Propriedades Físico-Químicas	7
Padrão de migração	8
Bibliografia	9

Estrutura Primária do péptido

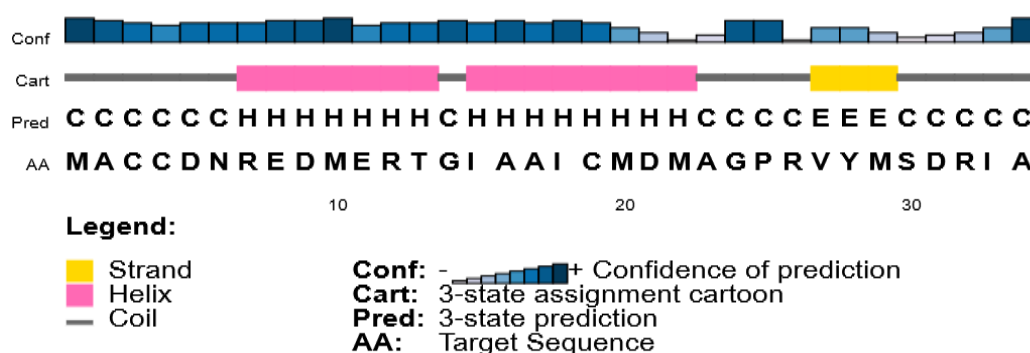
É o nível mais simples de estrutura de uma proteína e corresponde à sequência de aminoácidos, ligados através de ligações peptídicas.

A sua leitura é idêntica à dos péptidos (Terminal C para N Terminal).

A estrutura primária do nosso péptido é a seguinte:

M-A-C-C-D-N-R-E-D-M-E-R-T-G-I-A-A-I-C-M-D-M-A-G-P-R-V-Y-M-S-D-R-I-A.

Previsão da estrutura secundária



- Os resultados da previsão indicam que existirão três estruturas: duas hélices- α , uma folha- β e quatro segmentos sem estrutura definida (coils).
Até aos primeiros 20 aminoácidos, a confiança da previsão é moderada a forte. Após, o grau de confiança é reduzido com exceção de 6 aminoácidos.
A hélice- α e folha- β são estruturas estabilizadas por ligações de hidrogénio entre os grupos -NH e C=O da cadeia principal.
- Na hélice, o grupo C=O de um aminoácido liga-se ao hidrogénio do grupo -NH de outro aminoácido. Isto leva a cadeia polipeptídica a uma estrutura helicoidal que contém 3,6 aminoácidos. Dependendo dos resíduos de aminoácidos e das suas cadeias laterais, as hélices podem ser: polares, hidrofóbicas ou anfipáticas. As cadeias em folha- β podem apresentar-se paralelas ou antiparalelas.
- Qual o peso molecular?

Number of residues:	34
Molecular weight:	3797.43 g/mol

Estrutura Terciária

- A estrutura geral tridimensional de um polipeptídeo é chamada de **estrutura terciária**. Esta estrutura resulta das interações entre os grupos R (cadeias laterais) dos aminoácidos que compõem a proteína.
- Interações de grupo R que contribuem para a estrutura terciária incluem ligações de hidrogênio, ligações iônicas, interações dipolo-dipolo, ligação iônica e forças de dispersão London. Também é importante para a estrutura terciária **as interações hidrofóbicas**, nas quais aminoácidos não polares, grupos hidrofóbicos R juntam-se no interior da proteína, deixando aminoácidos hidrofílicos no exterior para realizar interações com as moléculas de água ao seu redor.
- Existe um tipo especial de ligação covalente que pode contribuir para a estrutura terciária: a ponte de persulfureto. As **pontes de persulfureto**, ligações covalentes entre as cadeias laterais de cisteínas contendo enxofre, são muito mais fortes que os outros tipos de ligações que contribuem para a estrutura terciária. Este tipo de ligação mantém partes específicas do polipeptídeo presas uma à outra.

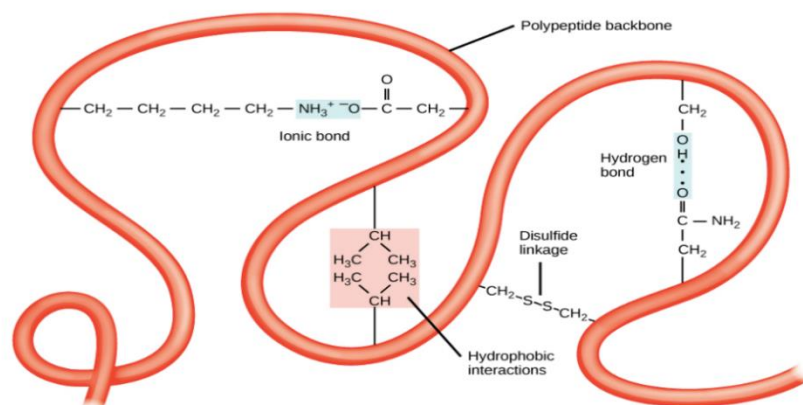


Figura 1: Imagem de uma cadeia polipeptídica hipotética, representando diferentes tipos de interações da cadeia lateral que contribuem para a estrutura terciária. Entre elas estão as interações hidrofóbicas, ligações iônicas, ligações de hidrogênio e formação de pontes dissulfeto.

Estrutura Quaternária

- Muitas proteínas são constituídas por uma cadeia única de polipeptídeos e têm apenas três níveis de estrutura. No entanto, algumas proteínas são constituídas por várias cadeias polipeptídicas, também conhecidas como subunidades. Quando estas subunidades se juntam, dão à proteína a sua **estrutura quaternária**.
- Normalmente, os mesmos tipos de interações que contribuem para a estrutura terciária (principalmente pontes de hidrogênio e forças de dispersão de London) também mantêm as subunidades juntas para formar a estrutura quaternária.

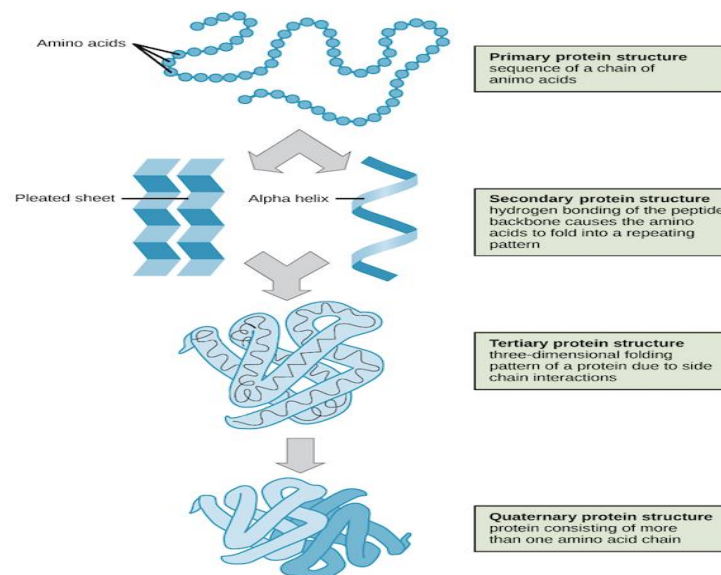


Figura2: Fluxograma representando as quatro ordens da estrutura da proteína.

Imagem adaptada da modificação de arte de OpenStax Biology pelo Instituto Nacional de Pesquisa do Genoma Humano dos EUA.

- Este péptido tem estrutura terciária e quaternária, tem estrutura tridimensional estabilizada por ligações covalentes, nomeadamente através de pontes persulfureto, pois tem 3 cisteínas. Pode ainda fazer estruturas homo-oligoméricas (por exemplo dímeros) unidos por ligações covalentes (pontes persulfureto), pois apenas um tipo de unidade de proteína é usado no complexo.

Comportamento ácido-base

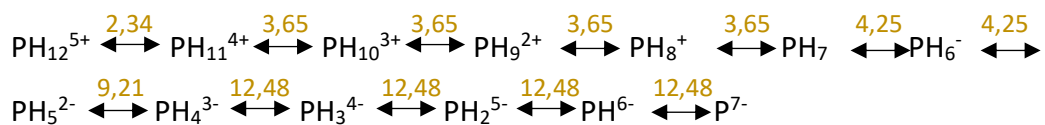
NH_3^+ -MET- ALA-CYS-CYS-**ASP**-ASN-**ARG**-**GLU**-**ASP**-MET-**GLU**-**ARG**-THR-GLY-ILE-ALA-ALA-ILE-CYS-
MET-**ASP**-MET-ALA-GLY -PRO-**ARG**-VAL-TYR-MET-SER-**ASP**-**ARG**-ILE-ALA-COOH

Legenda:

-RH **Ácido**

-RH⁺ **Básico**

- NH_3^+ MET pKN = 9,21 (8)
- COOH ALA pKC = 2,34 (1)
- 4xRH⁺ ARG pKR = 12,48 (9,10,11,12)
- 4xRH ASP pKR = 3,65 (2,3,4,5)
- 2xRH GLU pKR = 4,25 (6,7)



Ponto isoelétrico: PH_7

$$\text{pI} = (\text{pKR ASP} + \text{pKR GLU}) / 2 = 3,95$$

($\text{PH}=7$): PH_5 (carga -2)

Propriedades Físico-Químicas

- Polaridade:

Na sequência existem:

5 Metioninas-	Apolar
5 Alaninas-	Apolar
3 Cisteínas-	Polar Neutro
4 Aspartatos-	Polar Negativo
1 Asparagina-	Polar Neutro
4 Argininas-	Polar Positivo
2 Glutamatos-	Polar Negativo
1 Treonina-	Polar Neutro
2 Glicinas-	Apolar
3 Isoleucinas-	Apolar
1 Prolina-	Apolar
1 Valina-	Apolar
1 Tirosina-	Apolar
1 Serina-	Polar Neutro

Na sequência há um total de 34 aminoácidos, onde:

(%) aminoácidos Apolares = $(18/34) \cdot 100 = 52,9\%$

(%) aminoácidos Polares Neutros = $(6/34) \cdot 100 = 17,7\%$

(%) aminoácidos Polares Positivos = $(4/34) \cdot 100 = 11,7\%$

(%) aminoácidos Polares Negativos = $(6/34) \cdot 100 = 17,7\%$

Ou seja o péptido é maioritariamente Apolar com 52,9%

- Absorvência de radiação UV:

Apenas a Tirosina tem impacto na absorvência do péptido, estando apenas uma presente, irá conter pouca absorvência na região dos 280 nm.

Padrão de migração

$\text{NH}_3^+ - \text{MET} - \text{ASP} - \text{GLU} - \text{MET} - \text{COOH}$

- NH_3^+ MET $\text{pK}_\text{N} = 9,21$ (4)
- COOH MET $\text{pK}_\text{C} = 2,28$ (1)
- RH ASP $\text{pK}_\text{R} = 3,65$ (2)
- RH GLU $\text{pK}_\text{R} = 4,25$ (3)

Equilíbrio químico:



Ponto isoelétrico: PH_3

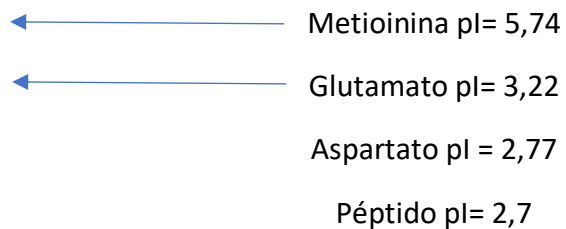
$$(2,28 + 3,65) / 2 = 2,7$$

Padrão de Migração:

Negativo

$\text{PH}=7$

Positivo



Bibliografia

- Power Points disponibilizados pela docente da U.C (“BQ cap2 1 1 AAs.pdf”);
- <https://pt.khanacademy.org/science/biology/macromolecules/proteins-and-amino-acids/a/orders-of-protein-structure>;
- https://moodle.ips.pt/1920/pluginfile.php/7167/course/section/2470/BQ_cap2_1_3_proteinas_Funcoes_Estruturaproteinas_fibrosas.pdf;
- http://w3.ualg.pt/~pmartel/cadeiras/be/aulas/aula_9.pdf;