

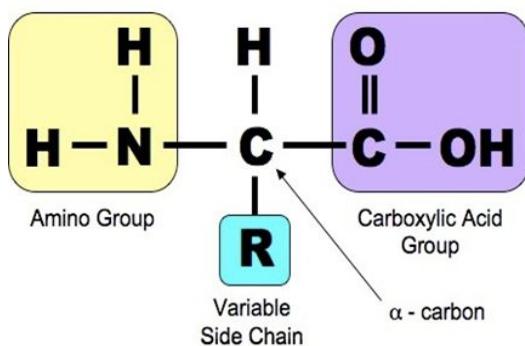
Aminoácidos: Estrutura e Propriedades

1. Estrutura de Aminoácidos

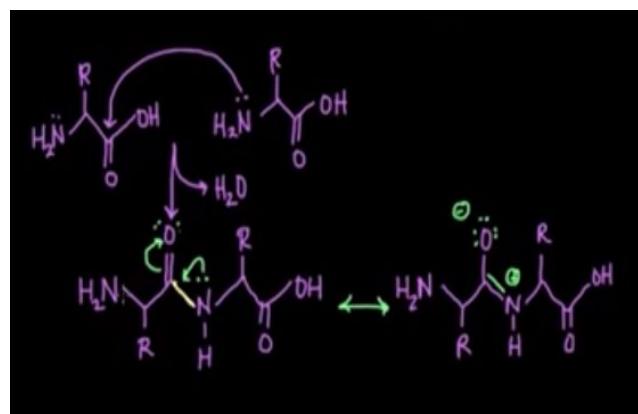
Os aminoácidos são os “building blocks” de péptidos e proteínas e, embora todos tenham elementos comuns de um grupo amina, um grupo carboxilo e uma cadeia lateral, os vários grupos funcionais que compõem a cadeia lateral dão a cada aminoácido propriedades

físicas distintas que influenciam a proteína formação e função. São denominadas como ácidos α -aminocarboxílicos, formando di-, tri-, oligo- e poli-peptídeos dependendo do número de resíduos de aminoácidos juntados pelas ligações peptídicas.

As ligações peptídicas são formadas pela reação adição-eliminação nucleofílica que ocorre quando

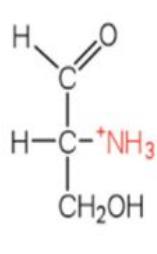
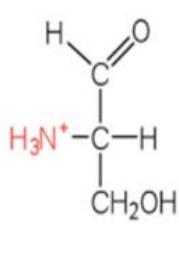


o nucleófilo NH_2 do terminal N de um aminoácido ataca o carbono carbonílico do terminal C do outro com a saída de água. O grupo carboxilo do aminoácido deve ser ativado para proporcionar um grupo de partida melhor do que OH^- e esse processo é feito pelo uso de ATP. Além disso, todos contêm grupo amino primário menos a prolina que contém grupo amino secundário incorporado em um anel de 5 membros. Existem 20 aminoácidos comuns quais são divididos em essenciais - isoleucina, leucina, valina, fenilalanina, metionina, treonina, triptofano, lisina, histidina; e não-essenciais - alanina, ácido aspártico, ácido glutâmico, cisteína, glicina, glutamina, prolina, serina, tirosina, arginina e asparagina. Cada aminoácido tem abreviação de 3 letras e mais recente de uma letra (Tabela).



1.2 Estereoquímica

O carbono alfa ($\text{C}2$) é o centro quiral em todos os aminoácidos menos glicina (que tem 2 substituintes de H) e assim são opticamente ativos – desviam o plano da luz polarizada. Com essa quiralidade, os aminoácidos possuem 2 enantiomeros (R e S). Menos cisteína, todos os aminoácidos têm configuração-S. A configuração L e D também existe em aminoácidos onde isômero dextrogiro (D) é luz direcionada para a direita e isômero levogiro (L) é luz direcionada para a esquerda. Na forma L, o grupo $\alpha - \text{NH}_3^+$ está projetado para a esquerda, enquanto na forma D,



está direcionado para a direita. A forma de L-aminoácidos é usada em humanos e forma D é encontrada na parede celular de bactérias.

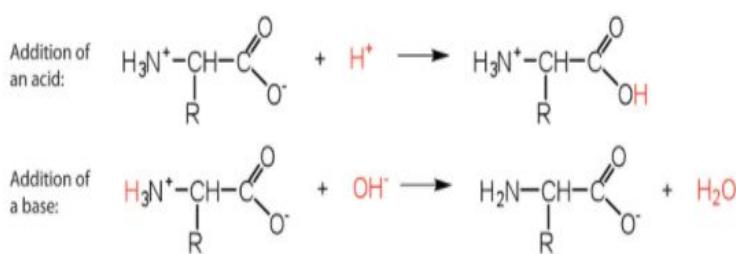
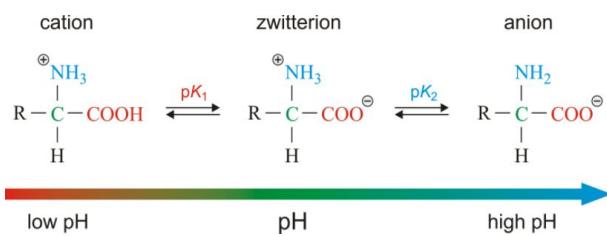
Tabela. Classificações de aminoácidos comuns

Polar		Não Polar		Carregado Eletronicamente			
				Ácido		Básico	
Serina (Ser)	S	Glicina (Gli)	G	Aspartato (Asp)	D	Lisina (Lys)	K
Treonina (Thr)	T	Alanina (Ala)	A	Glutamato (Glu)	E	Arginina (Arg)	R
Cisteína (Cys)	C	Valina (Val)	V			Histidina (His)	H
Tirosina (Tyr)	Y	Leucina (Leu)	L				
Asparagina (Asn)	N	Isoleucina (Ile)	I				
Glutamina (Gln)	Q	Metionina (Met)	M				
		Fenilalanina (Phe)	F				
		Triptofano (Trp)	W				
		Prolina (Pro)	P				

2. Propriedades de Aminoácidos

2.1 Propriedades Ácido-Básico

A estrutura de um aminoácido permite a existência de ambos formas do ácido e da base, ou seja são anfóteros. Um aminoácido tem essa habilidade porque, em um certo valor de pH (diferente para cada aminoácido), quase todas as moléculas de aminoácidos existem nos zwitterions, a forma em que o aminoácido tem carga elétrica neutra. Se o ácido for adicionado a uma solução contendo o zwitterion, o grupo carboxilato captura um íon de hidrogênio (H^+) e o aminoácido torna-se carregado positivamente atuando como uma base. Se a base for adicionada, a remoção de íons do íon H^+ do grupo amino do zwitterion produz um aminoácido carregado negativamente atuando como um ácido. Em ambas as circunstâncias, o aminoácido atua para manter o pH do sistema, isto é, remover o ácido (H^+) ou a base (OH^-) adicionados da solução. A forma de carboxilato de amônio é favorecida pois o íon amônio é muito menos ácido (pK_a entre 10 a 11) do que o ácido carboxílico (pK_a entre 2 a 5). A maioria de zwitterions altamente polares formam estruturas

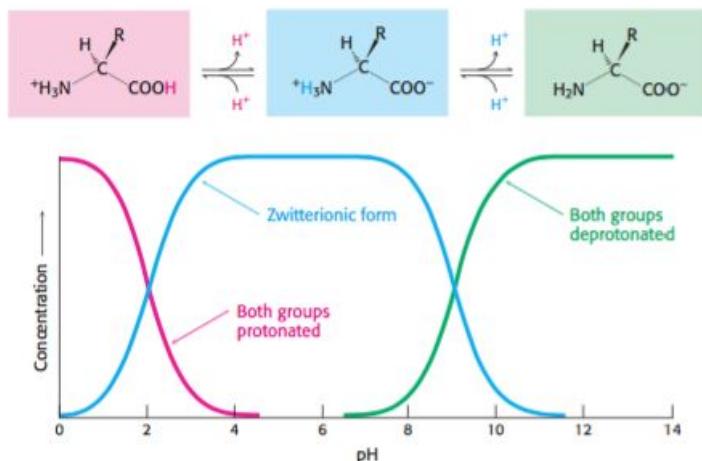


cristalinas particularmente fortes e são pouco solúveis em solventes orgânicos e eles decompõem sob aquecimento, sem fundir. A estrutura dos aminoácidos dissolvidos em água depende do pH: em pH baixo tem pKa do α -COOH; em pKa do α -NH₃⁺; e em pKa da função ácida em grupo R.

2.2 Ponto Isoelétrico

O ponto isoelétrico é o pH característico quando não há uma carga elétrica líquida (no net charge), aquilo com que a extensão da protonação se iguala à da desprotonação. Nesse pH a concentração da forma com carga neutra,

$$pI = \frac{pK_{a1} + pK_{a2}}{2}$$



Neste caso, a média é calculada pelos pKa usada é o par de valores quais são similarmente ionizados.

2.3 Derivados de aminoácidos e aminoácidos incomuns

Além dos aminoácidos primários, existem também mais de 200 resíduos de aminoácidos não primários chamados aminoácidos derivados. Geralmente eles são os resultados de aminoácidos comuns depois de sofrer modificações como metilação, iodação. Alguns exemplos incluem diiodotirosina, tiroxina, hidroxiprolina e hidroxilisina.

2.3.1 Aminoácidos Incomuns

- Hidroxilisina e hidroxiprolina:** Estes são encontrados no colágeno protéico. O colágeno é uma proteína fibrosa constituída por três polipeptídos que formam um conjunto estável, mas apenas se os resíduos de prolina e lisina são hidroxilados. (requer vitamina C para redução destes aminoácidos em forma hidroxi)
- Tiroxina:** um derivado iodado de tirosina, encontrada na tireoglobulina (produzida pela glândula tireoidea, requer iodo na dieta)
- Ácido g-carboxilglutâmico:** ácido glutâmico com dois grupos carboxilo encontrado em certas enzimas de coagulação do sangue (requer vitamina K para produção)

zwitteriônica é máxima. É a média dos dois pKa do aminoácido. Quando a cadeia lateral do aminoácido tem outras funções ácidas ou básicas, o pl aumenta ou diminui. O ponto isoelétrica é calculado pela média dos dois pKa do aminoacidos. Quando o aminoácido não tem cadeia lateral ionizante, o pl é a média aritmética dos pKas enquanto quando o aminoácido tem cadeia lateral ionizante existem 3 pKa possíveis.

- *N-metil arginina e n-acetil lisina*: encontrado em algumas proteínas de ligação a DNA conhecidas como histonas.

2.3.2 Derivados de aminoácidos não encontrados em proteínas

Existem alguns aminoácidos que não se destinam à incorporação em proteínas, e que possuem funcionalidades importantes por conta própria:

- A serotonina (derivado do triptofano) e o ácido g-amino butírico (um derivado do ácido glutâmico) são ambos neurotransmissores
- Histamina (derivado de histidina) envolvida na resposta alérgica
- Adrenalina (derivada de tirosina) um hormônio
- Vários antibióticos são derivados de aminoácidos (penicilina)

3. Referências

1. Vollhardt,K. Schore, N, Peter, K. Química Orgânica: Estrutura e Funções.
Páginas: 1157-63;
2. Bruice, Paula. Química Orgânica. (4 Edição) Páginas:1017-27;
3. https://www.chemicalbook.com/ProductCatalog_EN/1517.htm
4. <http://leah4sci.com/understanding-amino-acid-side-chain-characteristics-for-the-mcat/>
5. <http://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/VirtTxtJml/Images3/aminacid.gif>
6. [https://chem.libretexts.org/Textbook_Maps/Introductory_Chemistry_Textbook_Maps/Map%3A_The_Basics_of_GOB_Chemistry_\(Ball_et_al.\)/18%3A_Amino_Acids%2C_Proteins%2C_and_Enzymes/18.01_ProPERTIES_OF_AMINO_ACIDS](https://chem.libretexts.org/Textbook_Maps/Introductory_Chemistry_Textbook_Maps/Map%3A_The_Basics_of_GOB_Chemistry_(Ball_et_al.)/18%3A_Amino_Acids%2C_Proteins%2C_and_Enzymes/18.01_ProPERTIES_OF_AMINO_ACIDS)
7. https://chem.libretexts.org/LibreTexts/Athabasca_University/Chemistry_360%3A_Organic_Chemistry_II/Chapter_26%3A_Biomolecules%3A_Amino_Acids%2C_Peptides%2C_and_Proteins/26.01_Structures_of_Amino_Acids