

Ionização de cadeias laterais de aminoácidos, ponto isoelétrico e pH ótimo

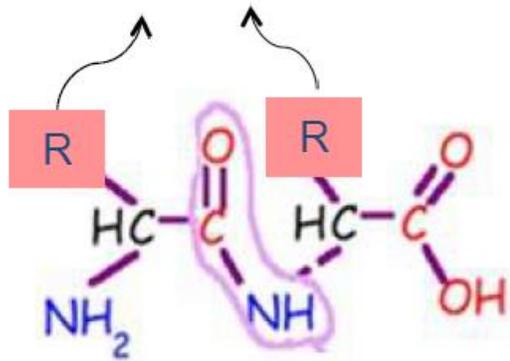
Aula 5

Nicolas Hoch

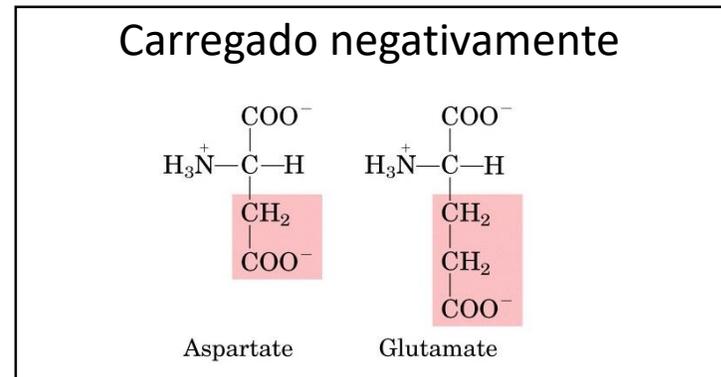
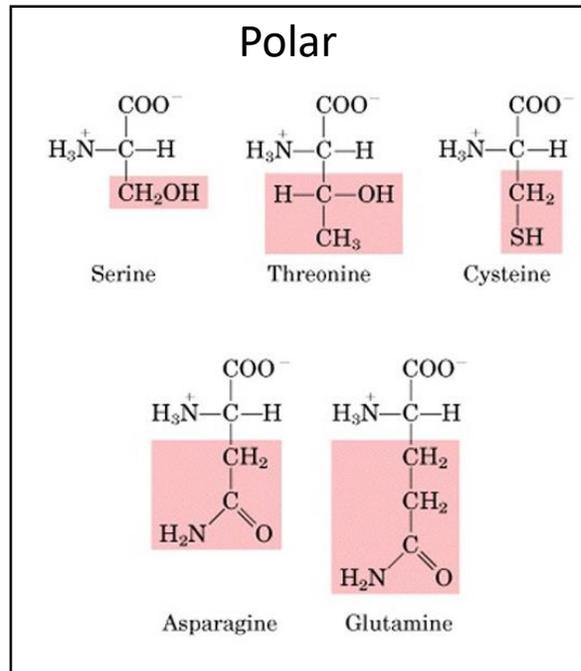
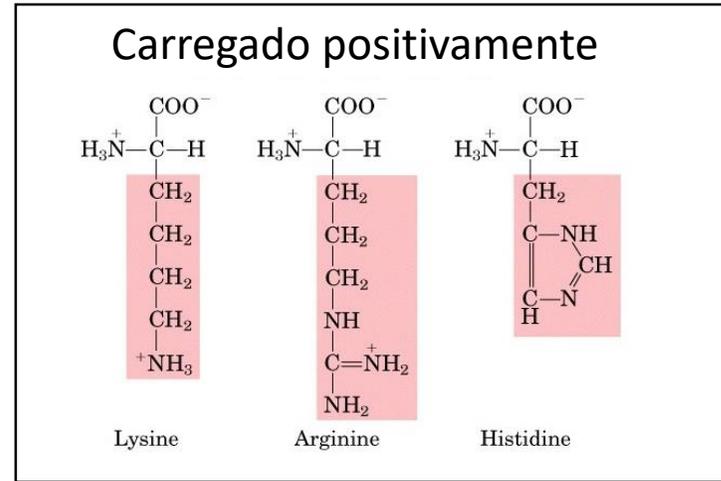
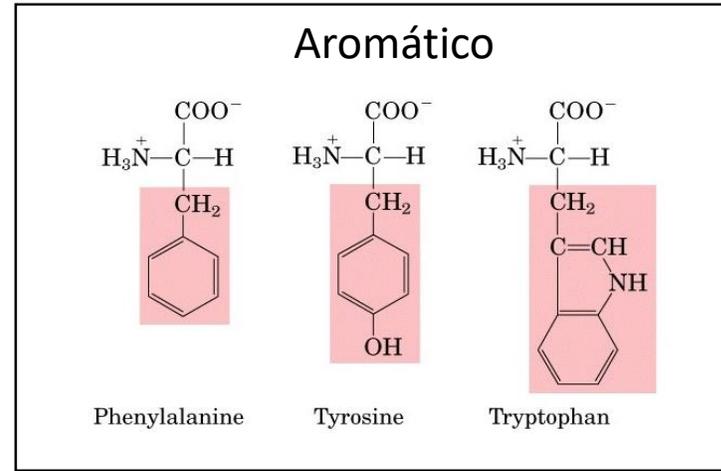
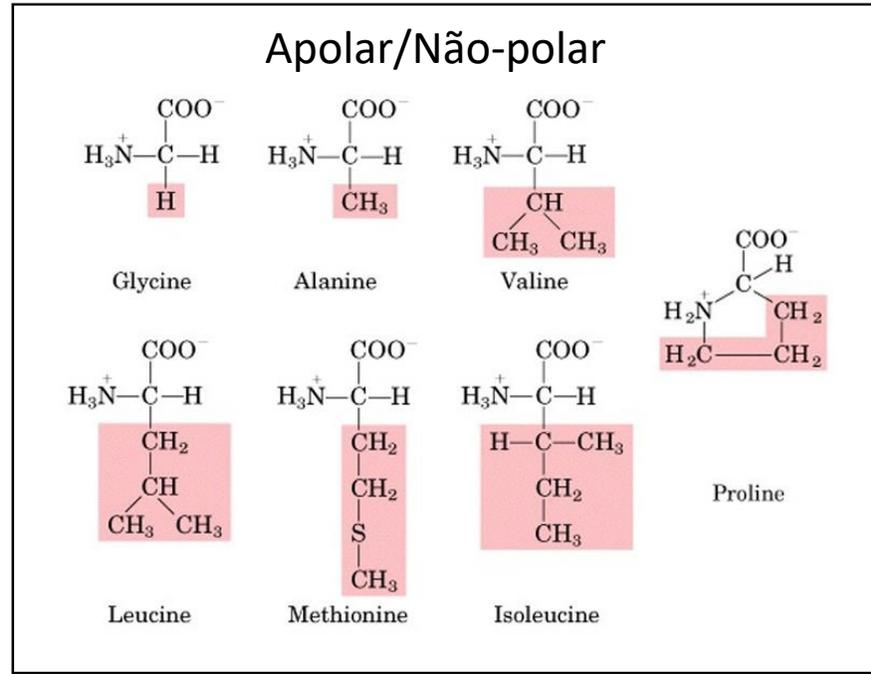
QBQ 0316 Noturno 2020

α -amino ácidos

Polares, não polares, aromáticos e carregados + ou - a pH ~ 7,0



α - COO⁻ e α -NH₃⁺ formam ligação peptídica



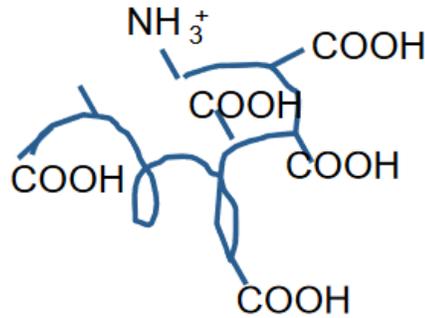
PONTO ISOELÉTRICO

-**Ponto isoelétrico (pI)** de uma proteína é igual ao pH onde a carga líquida da proteína é zero, e, portanto, ela não migra quando submetida a um campo elétrico.

Protein	pI
Pepsin	~1.0
Egg albumin	4.6
Serum albumin	4.9
Urease	5.0
β -Lactoglobulin	5.2
Hemoglobin	6.8
Myoglobin	7.0
Chymotrypsinogen	9.5
Cytochrome c	10.7
Lysozyme	11.0

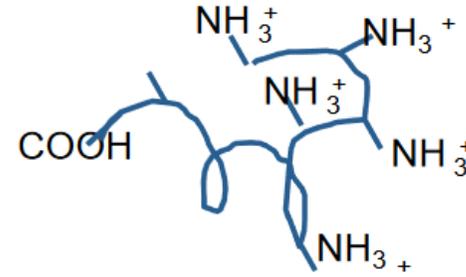
Depende da estrutura primária do conteúdo de aa ácidos e básicos

aa ácidos (Glu, Asp)



pI baixo

aa básicos (Lys, Arg)

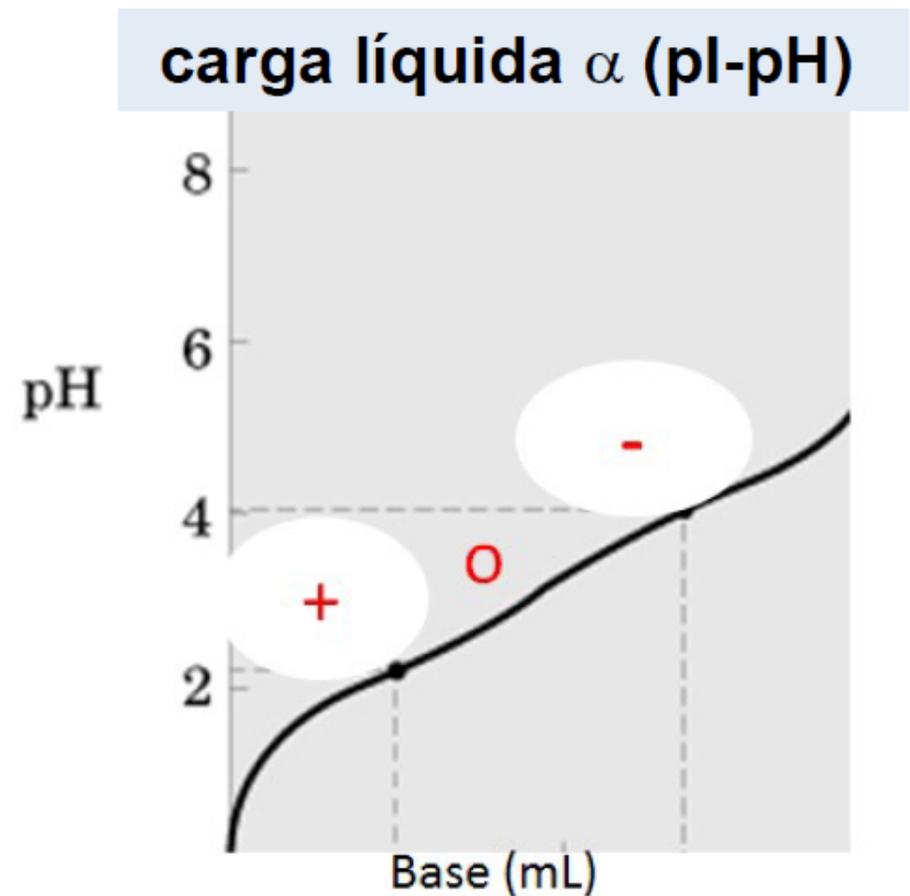


pI alto

CADA PROTEÍNA TEM UMA CARGA LÍQUIDA EM DADO pH

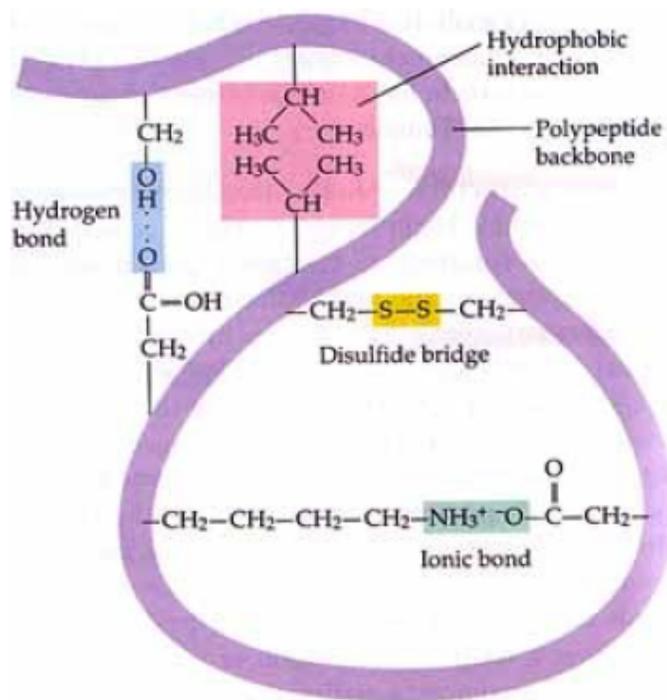
- A carga líquida de uma proteína num determinado pH é proporcional à diferença entre o pI da proteína e o pH no qual se encontra

Proteína	pI	Carga
Pesina	1,0	~ -5,0
Albumina soro	4,9	-1,1
Mioglobina	7,0	+1,0
Quimiotripsina	9,5	+3,5
Lisozima	11,0	+5,0



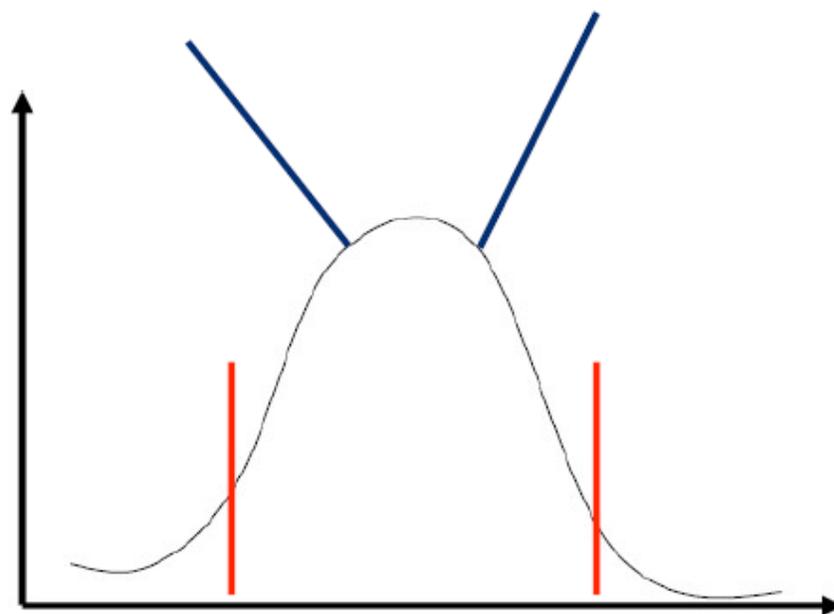
pH INFLUENCIA A CARGA, ESTRUTURA E AS FUNÇÕES (atividade enzimática)

-pH ótimo de uma enzima= pH no qual a atividade é máxima



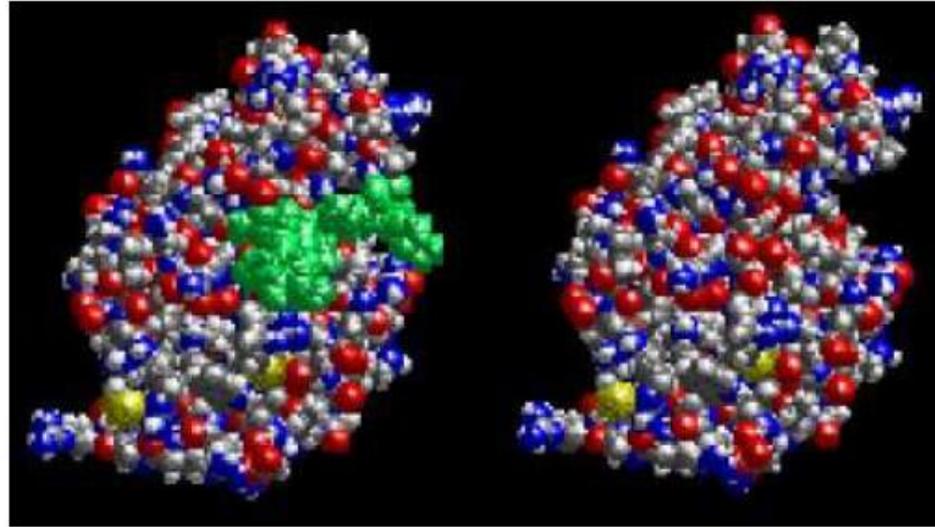
Ionização adequada de resíduos importantes p/ a catálise

Atividade relativa



Desnaturação (extremos de pH) pH

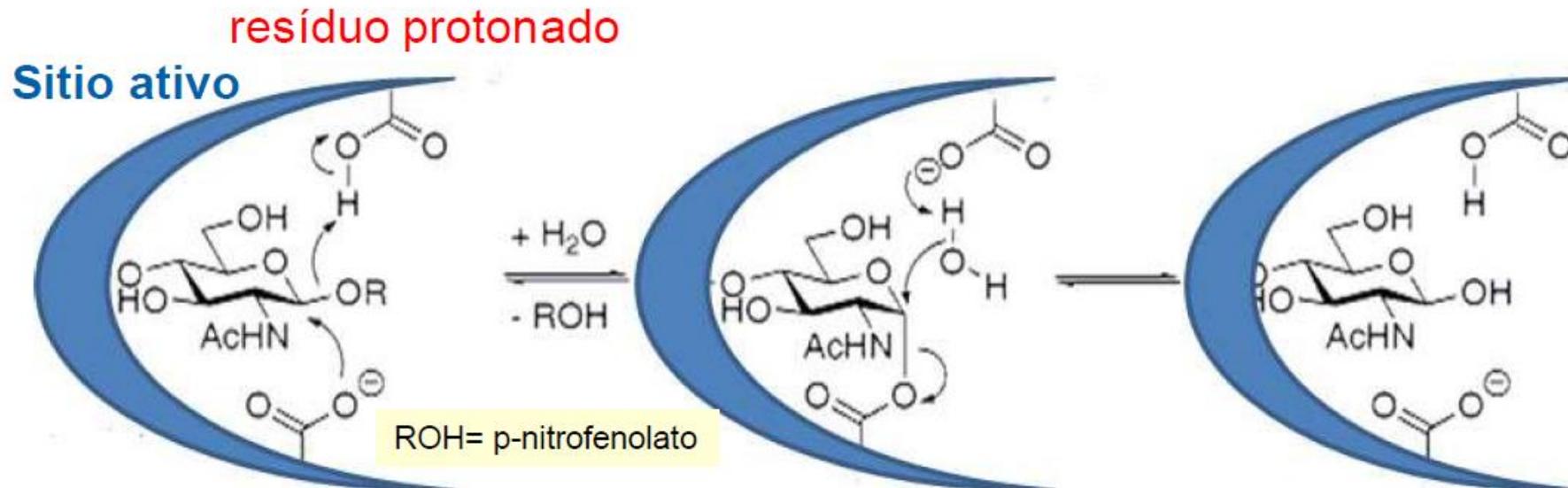
pH ÓTIMO E MECANISMO DE CATÁLISE



No sítio ativo, alguns resíduos de amino ácidos são importantes **para ligação do(s) substrato(s)** e outros resíduos (e eventuais cofatores) **participam do mecanismo de catálise** atuando como ácidos, bases, nucleófilos, etc..... Para desempenharem esses papéis devem estar no estado de ionização adequado.

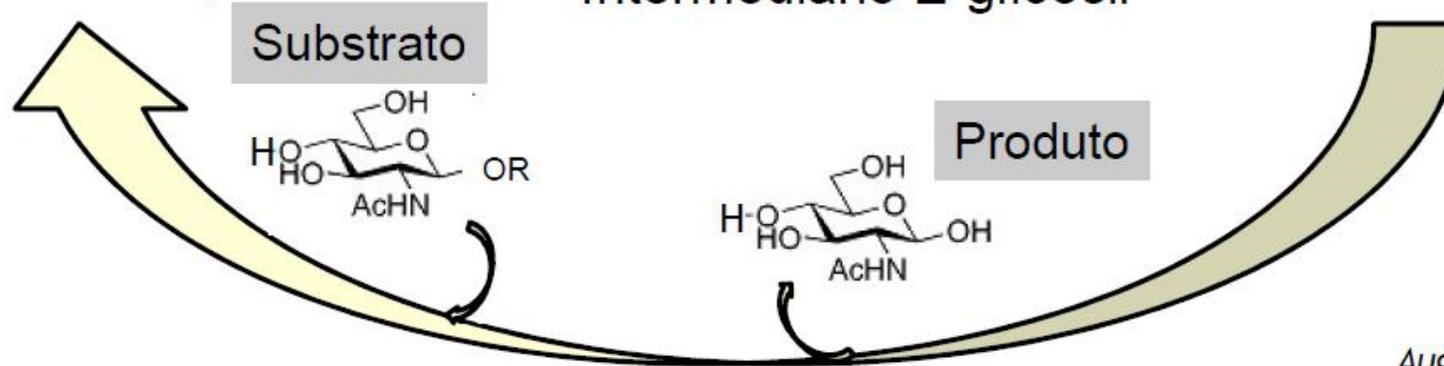


MECANISMO DE HIDRÓLISE DA LIGAÇÃO GLICOSÍDICA

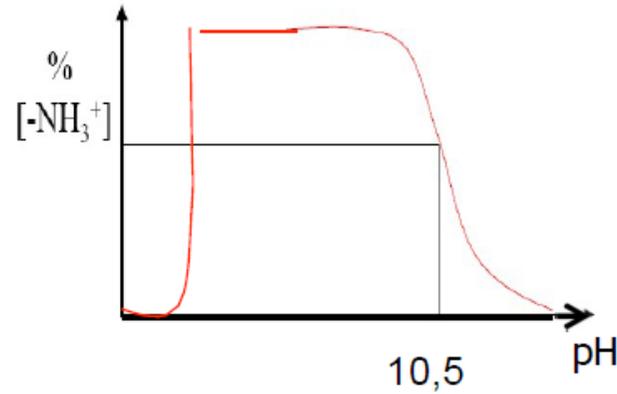
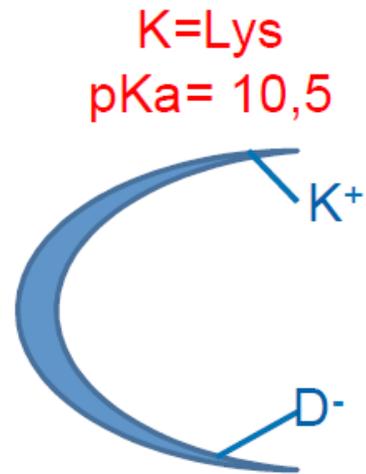


resíduo desprotonado

Intermediário E-glicosil



ESTADO DE IONIZAÇÃO QUE FAVORECE A CATÁLISE

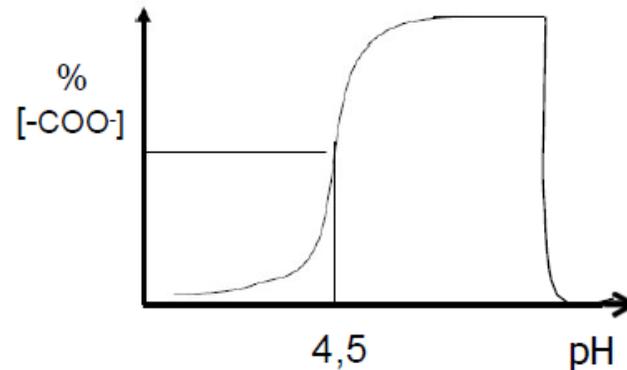


pH	[-NH ₃ ⁺]
2,5	100 %
4,5	100%
8,5	99%
9,5	90%
10,5	50%
11,5	10%
12,5	1%



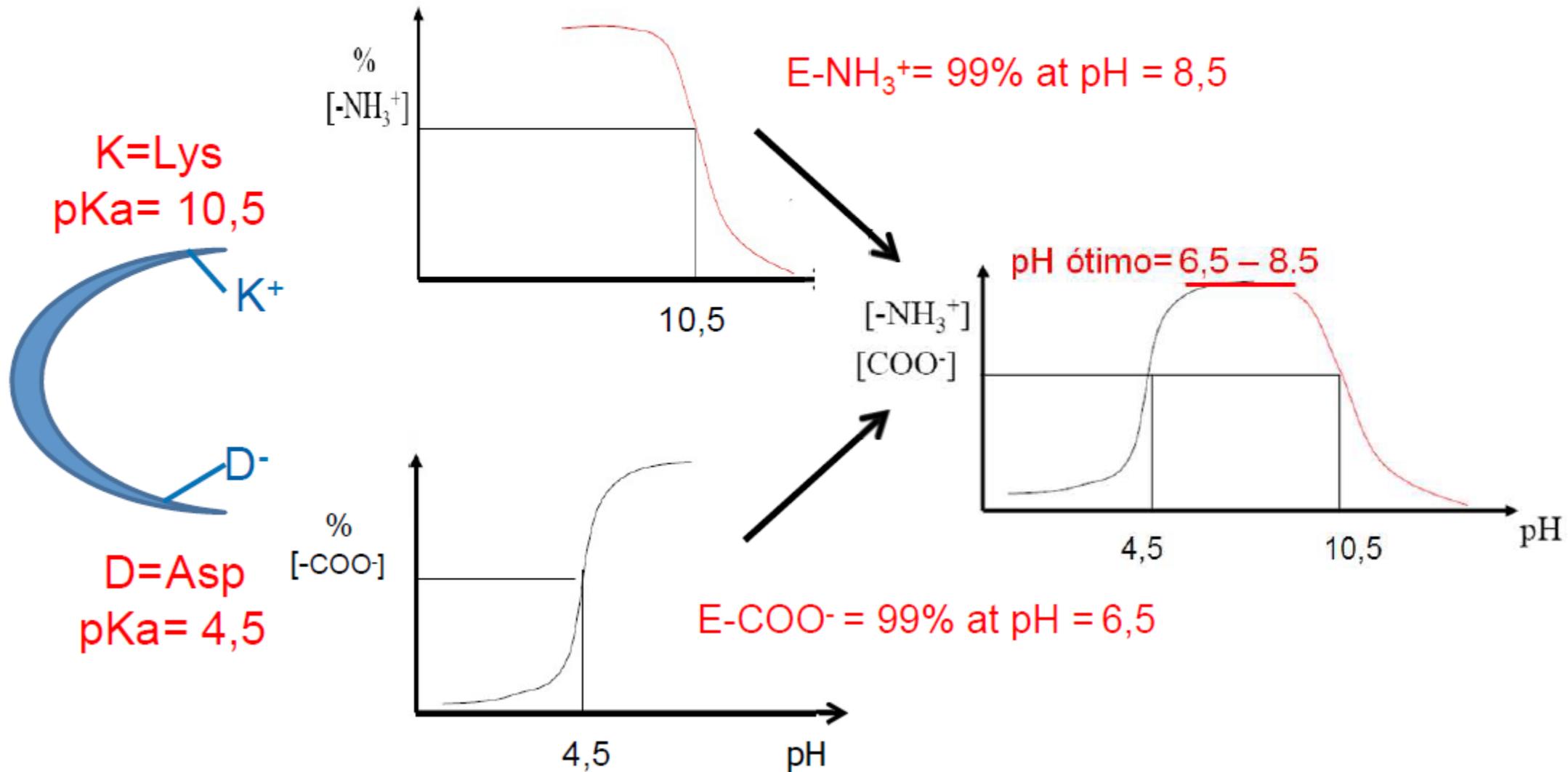
$$\text{pH} = \text{pKa} + \log \frac{\text{Base}}{\text{Ácido}}$$

D=Asp
pKa= 4,5



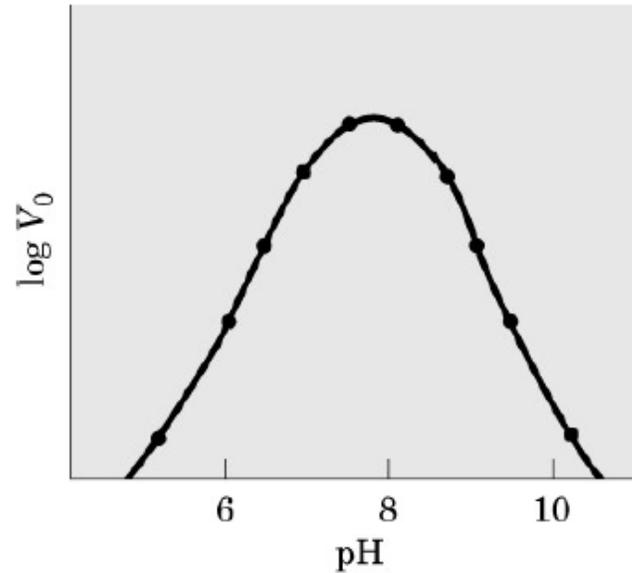
pH	[-COO ⁻]
2,5	1 %
3,5	10 %
4,5	50%
5,5	90%
6,5	99%

ESTADO DE IONIZAÇÃO QUE FAVORECE A CATÁLISE



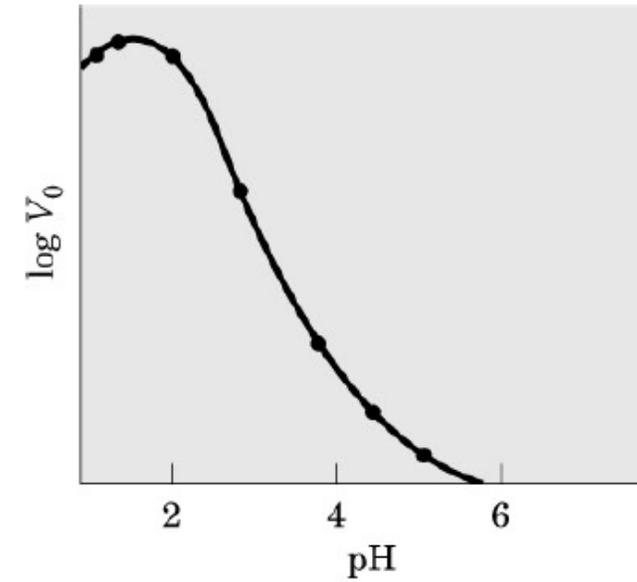
pH ÓTIMO E MECANISMO DE CATÁLISE

Selecionado em função do ambiente de atuação da enzima



Glucose 6-phosphatase

(b)
Liberação de glicose dos
hepatócitos-
pH do citosol= 7,2



Pepsin

Hidrólise de ligações peptídicas
no estômago-
pH suco gástrico= 1-2

pH ótimo fornece “dicas” sobre aa envolvidos na catálise embora
pKs dos resíduos de aa possam mudar bastante nas proteínas