

Uma nova escala de aminoácidos baseada na análise de diferentes tipos de interações aminoácido-água

**Luís Álvares-Ribeiro¹, Pedro P. Madeira², Ana Bessa², Alirio E. Rodrigues²,
M. Raquel Aires-Barros³ e Boris Y. Zaslavsky⁴**

¹ - *Requinte, Dep. Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto
Rua Campo Alegre 687, 4169-007 Porto, PORTUGAL.*

² - *Laboratory of Separation and Reaction Engineering, Dpt. de Engenharia Química, Faculdade de Engenharia
da Universidade do Porto, Rua Dr. Roberto Frias, s/n 4200-465, Porto, PORTUGAL.*

³ - *IBB-Institute for Biotechnology and Bioengineering, Centre for Biological and Chemical Engineering,
Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa, Portugal;*

⁴ - *Analiza, Inc. 3615 Superior Ave., Suite 4407b, Cleveland, OH 44114, USA.*

Sabe-se que o meio aquoso desempenha um papel activo no comportamento das proteínas, nomeadamente na aquisição e manutenção das suas estruturas secundária e terciária e na sua função *in vivo*. Assim, o estudo das interações proteína-água é importante, tanto sob o ponto de vista teórico como prático.

Uma vez que as proteínas são constituídas por aminoácidos, a quantificação e análise das interações destes com o meio aquoso é o primeiro passo fundamental para obter um conhecimento mais profundo das interações proteína-água.

Em trabalhos anteriores sugerimos¹ a aplicação da metodologia solvatocrómica para estudar as interações de moléculas biológicas com meio aquoso, através da caracterização das propriedades do meio nas fases em equilíbrio de múltiplos sistemas de duas fases aquosas (S DFA) e do uso de um conjunto adequado de sondas solvatocrómicas.

No presente trabalho determinámos, através de regressão linear múltipla, coeficientes específicos de solutos que representam a capacidade dos aminoácidos para participar em interações dipolo-dipolo, pontes de hidrogénio e interações eletrostáticas com o meio aquoso. Os coeficientes foram obtidos pela relação de energia de solvatação linear modificada

$$\log K_s = S_s \Delta\pi^* + A_s \Delta\beta + B_s \Delta\alpha + C_s c$$

e foram utilizados numa análise de Relação Quantitativa Estrutura-Propriedade.

Os resultados obtidos no presente trabalho mostram que se podem usar combinações lineares destes coeficientes específicos dos aminoácidos para estimar várias propriedades físico-químicas, estruturais e biológicas dos aminoácidos, com boas correlações.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio do projecto PTDC/EQU-EQU/112812/2009 da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT).

Referências

- (1) Madeira, P.P.; Reis, C.A.; Rodrigues, A.E.; Mikheeva, L.M.; Chait, A.; Zaslavsky, B.Y. *J. Chromatogr A*. 2011, 1218, 1379.