



ESTABILIDADE PROTEICA DA ALBUMINA SÉRICA BOVINA EM SISTEMAS AQUOSOS BIFÁSICOS

SANTOS TE¹, PEREIRA, MM³, SOUZA RL^{1,2}, FARIA CMS^{1,2} e LIMA AS^{1,2}

¹ Universidade Tiradentes

² Instituto de Tecnologia e Pesquisa, Laboratório de Pesquisa em Alimentos

³ Universidade de Aveiro, Departamento de Química

E-mail para contato do autor apresentador: tairaneutimio100@gmail.com

RESUMO EXPANDIDO

O Sistema Aquoso Bifásico (SAB) é uma técnica usada na área de biotecnologia, engenharia química e outras para extrair, purificar ou particionar diferentes moléculas de interesse. Esses sistemas são compostos por dois polímeros, polímero/sal ou polímero/Líquido iônico (LI). Entretanto, o particionamento de proteínas em sistemas contendo LI, se torna preocupante devido as possíveis interações específicas que podem interferir na estabilidade das proteínas (TAHA *et al.*, 2016). Portanto, esse trabalho foca na análise da estabilidade conformacional da Albumina Sérica Bovina (BSA) particionada em SABs formados por LIs ([Ch]Cl e o denominado de *Good Buffers* (LI-GB) [Ch][HEPES]) + Polietilenoglicol Metil Éter - 550 g/mol. Os diagramas e as linhas de amarração dos SABs foram formados seguindo a mesma metodologia de (VENTURA *et al.*, 2011). Os espectros de FTIR estão apresentados na Figura 1, as possíveis alterações na estrutura secundária da BSA foi investigada a partir de deconvoluções nos espectros de FTIR na região amida I (1600-1700 cm⁻¹) conforme a Figura 2, e da docagem molecular realizada através do Software AutoDock Vina.

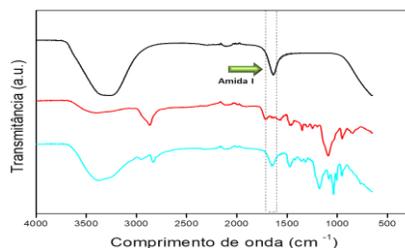


Figura 1: Espectros de FTIR: (■- solução aquosa contendo 1 mg/mL da BSA) e (fase de fundo dos sistemas, [Ch]Cl - ■; [Ch][HEPES] - ■)

Os espectros deconvoluídos apresentaram um grau de proximidade significativo aos espectros experimentais através do coeficiente de regressão ($R^2 = 0,98$ solução da BSA; $R^2 = 0,97$ [Ch]Cl; $R^2 = 0,98$ [Ch][HEPES]). Segundo Heidare *et al.* (2018) o elemento α -hélice é o mais importante para compreender a conformação proteica, o alto valor desse conteúdo reflete na estabilidade estrutural, o qual pode ser diminuído quando ocorre o desdobraimento da proteína.

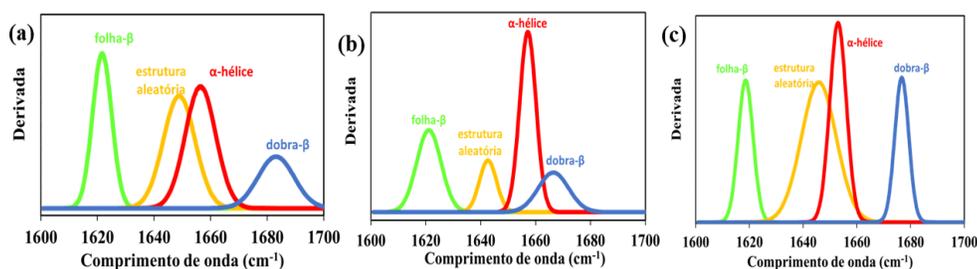


Figura 2: Espectros deconvolvidos na região da Amida I: (a) solução de BSA modelo; (b) BSA na fase rica em [Ch]Cl; (c) BSA na fase rica em [Ch][HEPES].

A partir da docagem molecular apresentada na Figura 3, foi possível obter os sítios de ligação e a energia livre entre a BSA e os LIs, onde a incorporação dos LIs a estrutura da BSA foi caracterizada por energias de ligações favoráveis na qual [Ch]Cl apresentou energia (-4.7 kcal/mol) e [Ch][HEPES] (-9.4 kcal/mol).

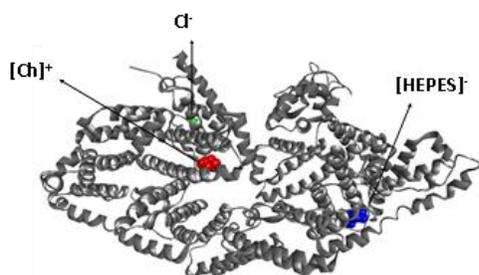


Figura 2: Docagem molecular da BSA com LIs: [Ch]Cl e [Ch][HEPES].

Portanto, o SAB formado por LI de *Good Buffer* [Ch][HEPES] apresentou o melhor resultado para estabilizar a BSA devido sua forte ligação com sua superfície proteica.

PALAVRAS-CHAVE: Sistema Aquoso Bifásico, Estabilidade Proteica, Docagem Molecular.

REFERÊNCIAS

TAHA, M.; KHAN, I.; COUTINHO, J. A. P. Coordination abilities of Good's buffer ionic liquids toward europium (III) ion in aqueous solution. *J. of Chem. Thermody.*, 94, p. 152–159, 2016.

HEIDARE, S.; HEMMATEENEJAD, B.; YOUSEFINEJAD, S.; MOVAHEDMOOSAVI, A. A. Excitation- emission matrix fluorescence spectroscopy combined with threeway chemometrics analysis to follow denatured states of secondary structure of bovine serum albumin. *J. of Lumines.*, 203, p.90-99, 2018.

VENTURA, S. P. M.; SOUZA, S. G.; FREIRE, M. G.; SERAFIM, L. S.; LIMA, A. S.; COUTINHO, J. A. P. Design of ionic liquids for lipase purification. *J. of Chromato. B.*, v. 879, p. 2679-2687, 2011.