



Associação em moléculas de um sítio e quatro sítios

Autor(es): GORGESKI, Andreia; KUHN, Paulo Sérgio

Apresentador: Andreia Gorgeski

Orientador: Paulo Sérgio Kuhn

Revisor 1: Alexandre Diehl

Revisor 2: Letícia Mendonça Ferreira

Instituição: UFP el

Resumo:

A associação de moléculas em soluções levando à formação de complexos é um fato comum em química e bioquímica. Nesse trabalho estudou-se a formação de complexos entre moléculas que interagem através de um potencial de curto alcance. Usou-se a forma de um poço quadrado de potencial, forma comum de representar uma interação de curto alcance entre moléculas. Consideram-se soluções de macromoléculas (espécie a) que associam com moléculas menores (espécie b). As macromoléculas estudadas podem ter um sítio ou quatro sítios. Nos sistemas com macromoléculas de um sítio tem-se apenas uma energia de interação presente: a energia de curto alcance, que é responsável pela associação. Assim, esta interação ocorre entre o sítio da macromolécula e uma molécula da espécie b. A energia livre do sistema é composta por um termo de gás ideal e pelo termo de associação, referente à formação dos complexos. Já para sistemas de macromoléculas com quatro sítios tem-se a mesma energia de interação entre cada sítio e as molécula b. Como há mais de um sítio, considera-se também a possibilidade da interação entre as moléculas associadas, que leva a uma associação cooperativa. No equilíbrio termodinâmico, ocorre a formação de complexos. Para um dado conjunto de valores das densidades (ρ), da temperatura e da energia de associação, tem-se uma saturação para cada complexo, isto é, a razão entre a densidade do complexo considerado e a densidade total de macromoléculas. Com as saturações pode-se calcular a fração de associação Y para as macromoléculas com quatro sítios. A curva de associação correspondente é sigmoideal, característica de um fenômeno cooperativo. O coeficiente n de Hill é a inclinação da curva entre as ordenadas -1 e $+1$, no gráfico $\log [Y / (1-Y)]$ x $\log \rho$. As saturações são calculadas minimizando a energia livre de Helmholtz, para valores fixos de temperatura, densidade da macromolécula e energia de associação. Para as macromoléculas de um sítio, por exemplo, a mioglobina obtém-se sempre $n=1$, característica de uma associação não cooperativa; como há apenas um sítio, não há cooperatividade. No caso de macromoléculas com quatro sítios, por exemplo, a hemoglobina, obtém-se n maior do que um, dependendo da energia de cooperação. Esse resultado é típico de uma associação cooperativa.