

Caracterização da esfera de coordenação de porfirinas

*Amanda R. Maia^{1,2}, Ignez Caracelli²

1. Curso de Graduação em Biotecnologia, Universidade Federal de São Carlos - UFSCar; *amandamaia.ufscar@gmail.com

2. BioMat – Departamento de Física, DF, UFSCar, São Carlos/SP, ignez@ufscar.br

Palavras Chave: *Caracterização, esfera, coordenação.*

Introdução

As porfirinas são macrociclos tetrapirrólicos formados por quatro anéis pirrólicos ligados entre si por pontes meteno. Estes compostos têm ocorrência natural e desempenham importantes papéis em processos tais como: respiração celular, transporte de oxigênio, oxidação de ácidos graxos, captação de luz e detoxificação de xenobióticos.¹ Há algum tempo elas vem atraindo a atenção e sendo alvos de investigação de cientistas de materiais, biólogos, químicos entre outros devido às possibilidades de aplicações de porfirinas sintéticas na catálise e em sensores ópticos,² por exemplo, e também para fazer a caracterização estrutural de proteínas biológicas buscando entender o seu funcionamento.

Em proteínas, as porfirinas aparecem geralmente na forma de complexos metálicos como ocorre na hemoglobina, na mioglobina, no citocromo c e na peroxidase. Nessas estruturas o complexo é denominado grupo heme, complexo da protoporfirina IX com ferro. Devido ao fato da esfera de coordenação do grupo heme na hemoglobina já ser conhecida³ e sabendo-se que a porfirina pode estar complexada a outros metais como o magnésio, o objetivo do projeto foi investigar a vizinhança de porfirinas cujo íon central fosse diferente do ferro buscando padrões na esfera de coordenação. Para isso foi feito um levantamento de estruturas que atendessem a este requisito no Protein Data Bank (PDB) e estas foram analisadas no programa de visualização gráfica DSVisualizer.⁴

Resultados e Discussão

O levantamento feito no PDB mostrou haver 12 tipos de protoporfirinas IX cujo íon central não é o ferro, sendo que em 3 tipos a protoporfirina não é coordenada (Tabela1). Para o trabalho foram analisadas somente as estruturas proteicas cuja protoporfirina tinha um íon central, totalizando 59 estruturas analisadas. Para a obtenção da esfera de coordenação de estruturas formadas por mais de um monômero foi feita a análise de cada monômero separadamente.

Para buscar por padrões na esfera de coordenação as estruturas foram comparadas em relação às suas classificações proteicas encontradas no PDB. As classificações encontradas foram: oxidoredutases, proteínas ligadoras de heme, transporte/armazenamento de oxigênio, proteína de transporte, proteína ligadora de oxigênio, proteína de transporte de elétrons e proteína ligadora de metal.

Tabela 1. Código do grupo de heteroátomos e seus respectivos íons.

Código PDB do grupo de heteroátomos	Íons coordenados
3ZZ	In
COH	Co
GIX	Ga
HEG	Mg
HNI	Ni
MNH	Mn ²⁺
MNR	Mn ³⁺
ZEM	Zn(II)
ZNH	Zn
H01	-
H02	-
PP9	-

Conclusões

Fazendo-se a correlação entre as esferas de coordenação e as classificações proteicas encontradas foi possível observar a existência de padrões. A classificação oxidoredutase 1.14 foi a que apresentou maior variação na esfera de coordenação das suas estruturas, isso pode ser devido aos diferentes tipos de moléculas presentes nesse grupo. Para as outras classificações proteicas a esfera de coordenação encontrada apresentou pouca variação.

Agradecimentos



IC - 306121/2013-2

ARM – PIBIC 123535/2013-1



ARM -2014/21845-1

¹Nelson, D. L.; Cox, M. M. Lehninger princípios de bioquímica. 4 ed. 157-158 e 161-163.

²Carvalho, C. M. B.; Brocksom, T. J.; De Oliveira, K. T. Tetrabenzoporphirins: synthetic developments and applications. *Chemical Society Reviews*, 42, 3175-3648, 2013.

³Berryman, V. E. J.; Baker, M. G.; Boyd, R. J. Effect of Amino Acid Ligands on the Structure of Iron Porphirins and Their Ability to Bind Oxygen. *The Journal of Physical Chemistry A*, 118, 4565-4574, 2014.

⁴Discovery Studio 3.5 - Accelrys Software Inc., *Discovery Studio Modeling Environment, Release 3.5*, 2012.