

Simpósio de Integração Acadêmica

“Ciências Básicas para o Desenvolvimento Sustentável”

SIA UFV 2023



ESTUDO TERMODINÂMICO E CINÉTICO DO USO DE COMPLEXOS PROTEICOS β -LACTOGLOBULINA-LACTOFERRINA NO ENCAPSULAMENTO DE VERMELHO CONGO

Mariana Souza Albuine, Luis Henrique Mendes da Silva, Isabela Araujo Marques, Hauster Maximiler Campos de Paula, Leonardo Saulo Pereira Alves
Cinética; Termodinâmica; Complexo Proteico

Introdução

Complexos proteicos (CP) são fundamentais em uma série de processos biológicos conhecidos, além de apresentarem propriedades físico-químicas únicas e estratégicas para inúmeras aplicações tecnológicas. A lactoferrina bovina (LF, Fig. 1) é uma glicoproteína que atua reguladora celular do ferro (Fe^{2+} e Fe^{3+}) e apresentam potencial como nanocarreadora de fármacos. Já a β -Lactoglobulina (β LG, Fig. 2) é a principal componente proteico do soro de leite bovino e, por ser uma proteína termossensível, permite a exposição de regiões em sua estrutura possibilitando diferentes tipos de interação com outros componentes em sistemas complexos. Estudos já verificaram a complexação dessas duas proteínas, a fim de identificar suas propriedades e seu potencial como biocarreadores. Entretanto, novos estudos são necessários para compreender como os CPs formam complexos com outras moléculas de interesse, qual a estabilidade desses complexos e sua dinâmica molecular.

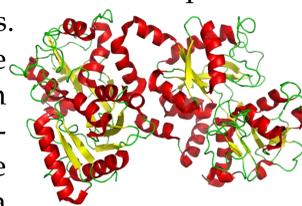


Fig. 1. Estrutura da LF.



Fig. 2. Estrutura da β LG

Objetivos

Investigar a termodinâmica e cinética da interação entre o corante Vermelho Congo (VC) e o CP β LG@LF, utilizando a técnica de ressonância plasmônica de superfície (RPS).

Material e Método



Resultados e Discussão

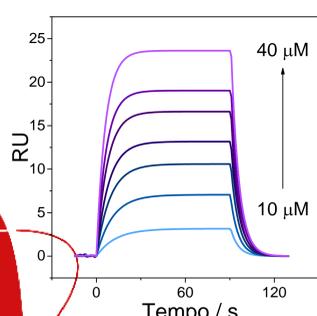


Fig. 3. Sensorgramas para a interação CP-VC.

A partir do ajuste global dos sensorgramas a um modelo de interação bimolecular simples, as constantes cinéticas de associação entre as moléculas livres de VC e $\text{LF@}\beta$ LG (k_a) e dissociação do complexo termodinamicamente estável $[\text{LF@}\beta\text{LG} - \text{VC}]^\circ$ (k_d) foram determinadas em diferentes temperaturas (T). O aumento de T causou um leve aumento tanto em k_a quanto k_d e, a partir de curvas de Arrhenius ($\ln k$ vs. $1/T$), os parâmetros energéticos de formação do complexo ativado $[\text{LF@}\beta\text{LG} - \text{VC}]^\ddagger$ pelas rotas de associação e dissociação foram calculados e estão listados na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros energéticos de formação do $[\text{LF@}\beta\text{LG} - \text{VC}]^\ddagger$, em diferentes T e pH 7,4.

T	Fase de associação				Fase de dissociação			
	E_a^\ddagger	ΔH_a^\ddagger	ΔG_a^\ddagger	$T\Delta S_a^\ddagger$	E_d^\ddagger	ΔH_d^\ddagger	ΔG_d^\ddagger	$T\Delta S_d^\ddagger$
K	kJ mol ⁻¹							
285,15		21,86	51,87	-30,01		6,48	74,07	-67,59
289,15		21,82	52,23	-30,40		6,44	75,01	-68,57
293,15	24,23	21,79	52,63	-30,84	8,85	6,41	75,94	-69,53
297,15		21,76	53,11	-31,35		6,38	76,91	-70,54
298,15		21,75	53,17	-31,42		6,37	77,14	-70,77
301,15		21,72	53,55	-31,83		6,34	77,87	-71,53

A formação do complexo ativado na fase de associação ocorreu com $\Delta H_a^\ddagger > 0$ e $T\Delta S_a^\ddagger < 0$, indicando que a barreira energética surge devido à dessolvatação do VC e do sítio de ligação do $\text{LF@}\beta$ LG e da perda de graus de liberdade do VC ao formar o complexo. Já os valores de $\Delta H_d^\ddagger > 0$ e $T\Delta S_d^\ddagger < 0$ indicam que as interações intermoleculares no $[\text{LF@}\beta\text{LG} - \text{VC}]^\circ$ são mais fortes devido, provavelmente, a mudanças conformacionais do sítio de ligação que resultou em uma estrutura mais flexível.

Tabela 2. Parâmetros termodinâmicos de formação do $[\text{LF@}\beta\text{LG} - \text{VC}]^\circ$, em diferentes T e pH 7,4.

T	K_b	ΔH°	ΔG°	$T\Delta S^\circ$
K	10^4 L mol^{-1}		kJmol ⁻¹	
285,15	1,17		-22,20	37,58
289,15	1,31		-22,78	38,16
293,15	1,42	15,38	-23,30	38,68
297,15	1,53		-23,80	39,18
298,15	1,58		-23,97	39,35
301,15	1,65		-24,31	39,69

A partir dos parâmetros cinéticos foi possível também a avaliação da termodinâmica de formação dos complexos. A Tabela 2 lista os parâmetros termodinâmicos obtidos. Os parâmetros termodinâmicos obtidos indicam alta afinidade entre VC e β LG@LF, sendo a formação do complexo dirigida entropicamente devido principalmente a dessolvatação das moléculas e mudanças conformacionais no sítio de ligação do CP.

Conclusões

Esses parâmetros revelam que as interações hidrofóbicas foram as forças motrizes de formação do complexo ativado e do complexo termodinamicamente estável.

Bibliografia

- Poppi, F.A, Costa M. R, De Rensis C. M. V. B., Sivieri K. Soro de Leite e Suas Proteínas: Composição e Atividade Funcional, UNOPAR Cient., **Ciênc. Biol. Saúde**. 2010; 12(2): 31-7
- Do Vale, R. T. R. et al, β -lactoglobulin and resveratrol nanocomplex formation is driven by solvation water release, **Food Research International**, Volume 158, 2022, 111567, ISSN 0963-9969, <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2022.111567>.

Apoio financeiro

