

ANALISE ESTRUTURAL DA TWINFILINA LIGADA A UM MONÔMERO DE ACTÍNIA.

II Encontro de Iniciação Acadêmica

Matheus Silva Santos, Valder Nogueira Freire, Geancarlo Zanatta

1. Introdução Nos anos de 1980 diversas proteínas com atividade de despolimerização de actínia(ADF), tiveram suas atividades identificadas em diversos vertebrados, de acordo com diversos autores da área a despolimerização é de acordo com o peso, se caso seu peso estiver em um determinado intervalo de 19 kDa, são conhecidos por pertencer essa família dos ADF, que possuem características específicas dessa grande família das Cofilinas, tais como a formação de filamentos com a actínia. 2. Objetivos Com a utilização de softwares, realizar a análise estrutural das proteínas por meio de cálculos com base na teoria funcional da densidade, para assim determinar a energia de interação entre fragmentos da proteína com o intuito de determinar alguma nova interação entre a Twinfilina e actínia, ou algum comportamento ainda não identificado entre essas duas proteínas. 3. Métodos Após o download do pdb, foram feitas suas correções pelo Swiss PDB Viewer, foi iniciado também a correção de PH da proteína pelo seu prop pka, onde manualmente foram feitas as correções necessárias. Logo foi iniciado o processo de recorte MFCC, onde com um script do programa é realizado um recorte de fragmentos da proteína de interesse, e após esse procedimento é realizado o cálculo quântico, utilizando-se o método de DFT com o modulo DMOL3, onde foram obtidos os valores das energias de interação entre cada um dos resíduos que se encontrava a um raio de 8Å da cadeia A (actínia) e de 10Å da cadeia B (Twinfilina), com tais resultados foram analisados os resíduos de maior significância energética. 4. Resultados Com esse método, foi possível a identificação dos resíduos que possuíam maior interação entre as duas proteínas, foram montados gráficos com os resultados obtidos. Como também foram montadas figuras dos resíduos.

Palavras-chave: proteínas. quântico. softwares. DFT.