



ciência desenvolvimento sociedade  
**XXVI SALÃO DE  
INICIAÇÃO CIENTÍFICA**

20 a 24 de outubro - Campus do Vale - UFRGS



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2014
<b>Local</b>	Porto Alegre
<b>Título</b>	AVALIAÇÃO DAS INTERAÇÕES ENERGÉTICAS ENTRE O RETINAL E OS AMINOÁCIDOS DA RODOPSINA BOVINA
<b>Autor</b>	DAVI PADILHA MESQUITA
<b>Orientador</b>	TADEU MELLO E SOUZA

## Avaliação das interações energéticas entre o retinal e os aminoácidos da rodopsina bovina

A retina humana possui proteínas fotorreceptoras, as rodopsinas, que exercem sua função por se ligarem a uma molécula de 11-cis-retinal, o cromóforo, através de uma base de Schiff protonada por uma de suas lisinas. Ainda não se conhecem completamente as energias de interação elétrica entre os resíduos de aminoácidos da proteína fotorreceptora e o 11-cis-retinal. Conhecendo-se as referidas energias, pode-se, então, melhor entender a importância de cada resíduo de aminoácido nas propriedades de absorção de luz da rodopsina. Realizamos uma seleção de subsistemas compostos pelo ligante e pelos resíduos de interesse e de blindagem, juntamente com seus resíduos vizinhos, a partir de dados cristalográficos obtidos no Protein Data Bank com os códigos 1U19 e 3CAP. Para todas as estruturas, obtivemos a distância entre cada resíduo e o retinal pela menor distância átomo-átomo. Até 6,5 Å, foram encontrados 50 resíduos para a opsina, 54 para a rodopsina com retinal posicionado via docking, e 58 para a rodopsina original. Observamos que determinados resíduos estão presentes em vários subsistemas, sugerindo sua importância na interação entre a proteína e o retinal. Esses resultados preliminares permitirão simulações numéricas de química computacional usando abordagens tanto de mecânica clássica quanto de mecânica quântica.

Auxílio financeiro: FAPERGS