

SALÃO DE  
INICIAÇÃO CIENTÍFICA  
**XXIX SIC**  
  
**UFRGS**  
PROPESQ



múltipla   
**UNIVERSIDADE**  
inovadora  inspiradora

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2017
<b>Local</b>	Campus do Vale
<b>Título</b>	Biologia Estrutural de UDP-Sulfoquinivose Sintase de <i>Picrophilus torridus</i>
<b>Autor</b>	DESSANDER GARCIA FACCIN
<b>Orientador</b>	HUGO VERLI

Título: Biologia estrutural de UDP-Sulfoquinovose-sintase de *Picrophilus torridus*

Autor: Dessander Garcia Faccin

Orientador: Hugo Verli

Instituição: UFRGS

A UDP-sulfoquinovose-sintase é uma enzima oxirredutase responsável por incorporar sulfoquinovose em glico-conjugados. Produz a forma nucleotídeo-ativada da sulfoquinovose, carboidrato sulfonatado de grande importância para a incorporação de sulfoquinovose em glico-conjugados. Essa enzima pode ser encontrada em plantas, fungos e bactérias, incluindo o procarionto extremófilo *Picrophilus torridus*, organismo que vive em ambientes de alto pH e temperatura e do qual existem pouquíssimas informações quanto à estrutura de sua UDP-sulfoquinovose sintase. Esse trabalho visa entender os determinantes estruturais da termo resistência dessa enzima afim de obter maiores informações acerca de sua estrutura e função, com vistas a sua aplicação biotecnológica na glicoengenharia de proteínas.

Utilizou-se para a construção da árvore filogenética o programa MEGA6. Foram utilizadas sequências da UDP-Sulfoquinovose sintase de cerca de 60 organismos unicelulares, 15 plantas e 15 fungos, adquiridas através do programa de buscas Blast P. Em seguida, foram filtradas utilizando o programa Expasy - Decreasy Redundancy e foram alinhadas pelo Clustal Ômega. A modelagem comparativa foi realizada utilizando como molde a estrutura da UDP-sulfoquinovose-sintase de *Arabidopsis thaliana* (código SQD1 no PDB), bem como o programa Modeller 9,17. As dinâmicas moleculares desse modelo foram realizadas no Gromacs.

Obtivemos, dentre os resultados, uma árvore filogenética com altos graus de confiança. A separação esperada entre grandes grupos (bacterianos, fúngicos e vegetais) se manteve. A árvore está sendo aprimorada para a obtenção de graus de confiança ainda melhores. Na modelagem comparativa, foram gerados cerca de 10 modelos. O escolhido apresentou 89,9% dos resíduos nas áreas favoráveis do Gráfico de Ramachandran, 9,9% em regiões aceitáveis, 0,3% em regiões generosamente aceitáveis e 0% de resíduos em regiões desfavoráveis. O modelo foi, portanto, considerado de alta qualidade estereoquímica, não havendo problemas no experimento.

Foi concluída uma dinâmica de 200ns e foram realizadas análises de RMSD, RMSF, superfície de contato com solvente, DSSP e raio de giro. O RMSD indicou que o modelo é estável e não varia muito sua conformação. O DSSP também indica estabilidade, pois também não foram observadas grandes variações nas estruturas secundárias. O procedimento foi repetido com correções na protonação de 3 histidinas para verificar se a protonação atribuída pelo Gromacs teria influência nas análises. Ambas as dinâmicas estão sendo comparadas e analisadas. Pretende-se ainda realizar dinâmicas a diferentes temperaturas, bem como dos ortólogos não-termo resistentes para comparação e dos diferentes complexos da enzima. Também será realizado um estudo do atracamento da mesma com seus substratos.