



**REENCONTROS
NOVOS ESPAÇOS
OPORTUNIDADES**

XXXIV SIC Salão Iniciação Científica

**26 - 30
SETEMBRO
CAMPUS CENTRO**

Evento	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2022
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Estudos das bases moleculares para distorções em carboidratos complexados a proteínas
Autor	FRANCISCO NUNES MIELKE
Orientador	HUGO VERLI

ESTUDO DAS BASES MOLECULARES PARA DISTORÇÕES EM CARBOIDRATOS COMPLEXADOS A PROTEÍNAS

Autor: Francisco Nunes Mielke

Orientador: Hugo Verli

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

Justificativa: Carboidratos (ou glicanos) são as biomoléculas mais abundantes na natureza, destacando-se por apresentarem funções biológicas, funcionais e de potencial terapêutico tão amplas quanto sua variedade estrutural. Sua participação em ácidos nucleicos, componentes estruturais, reserva de energia, dobramento proteico e reconhecimento celular exemplificam a extrema importância que possuem à manutenção do metabolismo celular. Infelizmente, a extensa gama de conformações e polímeros resultantes de carboidratos, bem como sua subvalorização no meio acadêmico impõe dificuldades ao estudo de suas propriedades e aplicações. Ademais, a cristalografia de raios-X, técnica mais utilizada para registrar a conformação de biomoléculas, não gera leituras fidedignas da estrutura de carboidratos complexados a proteínas (ou glicoproteínas). Dessa maneira, a elucidação das variáveis atuantes sobre a deformação de carboidratos presentes em glicoproteínas do banco de dados Protein Data Bank (PDB) pode prover importantes contribuições tanto à área básica quanto aplicada da ciência – oferecendo informações que enriqueçam a eficácia da projeção racional de fármacos, por exemplo. **Objetivos:** Dessa forma, o objetivo da presente pesquisa é elucidar as determinantes à distorção de hexopiranoses presentes em glicoproteínas do PDB. **Metodologia:** Com o propósito de realizar tal elucidação, foi-se empregado o uso de ferramentas computacionais de bioinformática estrutural. Foram aplicadas simulações computacionais de 100ns no formato de dinâmicas moleculares (DM), sob o campo de força 53A6 GLYC – conjunto de parâmetros altamente parametrizado para simulações em alta fidelidade de hexoses –, desenvolvido previamente pelo grupo. **Resultados:** As DMs realizadas com a estrutura da glicoproteína galectina-Ib, presente na pele do sapo *Xenopus laevis*, indicaram que a hexopiranosose α -glicose, quando complexada ao resíduo, apresenta distorção em sua conformação de cadeira. O mesmo não ocorre com a α -galactose, presente na estrutura do dissacarídeo. As próximas etapas do estudo poderão utilizar os dados gerados para identificar os parâmetros atuantes sob tais distorções.