

Neste trabalho investigou-se a interação do tetrâmero de melitina com uma bicamada lipídica através de simulações computacionais via metodologia Coarse Graining. Para isto, simulou-se o tetrâmero sob duas condições diferentes: em meio contendo uma membrana e inserido na membrana. Paralelamente também desenvolveu-se a simulação de um monômero de melitina em ambiente contendo a membrana. Pela comparação entre dados obtidos da simulação de um tetrâmero em meio fisiológico e de uma membrana íntegra, evidenciou-se que a presença dos polipeptídios é capaz de provocar alterações nas propriedades da membrana, embora a espontânea inserção do tetrâmero ou monômero na mesma não tenha sido observada. Os resultados reforçam a afinidade do polipeptídeo pelos grupos polares fosfatidil etanolamina e fosfatidil glicerol da membrana e sua tendência à coordenação com esta região. A organização tetramérica proposta neste estudo é bastante estável tanto em meio fisiológico quanto no meio lipofílico da bicamada, ainda que ocorra o rearranjo das unidades polipeptídicas entre si.