

A QS-21 é uma saponina extraída da *Quillaja saponaria*, que pode apresentar atividades antiglicêmica e antitumoral, ação no sistema cardiovascular e redução do colesterol plasmático. Outra propriedade importante desta macromolécula é o seu uso promissor como imunoadjuvante em diversos testes clínicos de vacinas contra doenças infecciosas e câncer. Entretanto, alguns problemas como a instabilidade química e a formação micelar, cujo mecanismo ainda é desconhecido, impedem uma evolução no uso terapêutico. Ainda neste contexto, a compreensão do comportamento molecular da QS-21 e os efeitos na forma de membrana podem prover subsídios a estudos envolvendo o desenvolvimento de imunopotenciadores. Portanto, este trabalho visa analisar e avaliar o processo de formação micelar da saponina QS-21, bem como a forma da micela, pelo método de Dinâmica Molecular (DM), incluindo a caracterização conformacional desta saponina. As ligações glicosídicas foram caracterizadas por mapas de contorno e o refinamento do modelo foi feito utilizando o pacote de simulações do GROMACS e o campo de força GROMOS96 43a1. Todas as unidades componentes da saponina foram caracterizadas, permitindo a construção de um modelo tridimensional, elucidando sua conformação. Simulações de DM estão sendo realizadas para observar a formação micelar, previamente caracterizada por técnicas de SAXS. Dados de distribuição radial apontam que a ligação éster presente na cadeia acila (importante na atividade imunoadjuvante) é menos solvatada com a formação micelar, desta forma possivelmente evitando a hidrólise dessa porção, conforme indicam dados experimentais prévios.