

014

ESTRUTURAS MODELADAS E DINÂMICA MOLECULAR DE UREASES VEGETAIS.

RODRIGO LIGABUE BRAUN, Evelyn Koeche Schroeder, Marcela Proença Borba, CELIA REGINA RIBEIRO DA SILVA CARLINI (orient.) (UFRGS).

Amplamente distribuídas em plantas, fungos e bactérias, as ureases (EC 3.5.1.5) são enzimas níquel-dependentes que catalisam a hidrólise da uréia a amônia e dióxido de carbono. Sabe-se que as ureases apresentam várias propriedades biológicas que são independentes de sua atividade ureolítica, como ativação de plaquetas, interação com glicocjugados e atividade inseticida. Em plantas e fungos, as ureases são homopolímeros de subunidades com ~840 aminoácidos, formando trímeros ou hexâmeros. As ureases bacterianas possuem duas ou três subunidades menores que alinham com a seqüência única das ureases vegetais com ~55% de identidade. Uma vez que a estrutura tridimensional de ureases vegetais e fúngicas ainda não foi resolvida, modelos para uma das ureases de *Canavalia ensiformis* (feijão-de-porco) e para as ureases ubíqua e embrião-específica de *Glycine max* (soja) foram construídos por modelagem comparativa com MODELLER9v4, usando estruturas de ureases bacterianas como moldes. Estudos de dinâmica molecular desses modelos foram realizados com GROMACS 3.3.1. As enzimas totalmente solvatadas foram simuladas por 10ns utilizando o campo de força GROMOS96, a 300K em um *ensemble* NTP. As três estruturas modeladas compartilham da mesma estrutura global, com notáveis diferenças em suas regiões interdomínios. As trajetórias de dinâmica molecular mostraram a flexibilidade esperada para as abas dos sítios ativos e a manutenção da estrutura deste ao longo de toda a simulação. Os domínios parecem mover-se de maneira independente nas ureases analisadas. Esses estudos devem auxiliar a compreensão da base estrutural das propriedades biológicas das ureases vegetais.