

227

SIMULAÇÃO DE MEMBRANAS EM MISTURAS ÁGUA/ DMSO. *Elisa Bielscki, Hubert Karl Stassen (orient.) (UFRGS).*

Através da metodologia de simulação computacional por dinâmica molecular, foi feito o estudo do efeito do Dimetilsulfóxido (DMSO) sobre os fosfolipídios Palmitoil-Oleil-Fosfatidil-Etanolamina (POPE) e Palmitoil-Oleil-Fosfatidil-Glicerol (POPG) em meio aquoso com íons Cloro e Sódio em concentração fisiológica. As simulações foram realizadas com o campo de força GROMOS e o software GROMACS. A Função de Distribuição Radial (RDF) foi utilizada como principal recurso de análise de estruturação nos sistemas estudados. Neste estudo temos por objetivo desenvolver uma membrana bacteriana, representada por uma bicamada composta pelos fosfolipídios já estudados (POPE e POPG), a fim de elucidar o efeito do Dimetilsulfóxido (DMSO) sobre a mesma. A membrana escolhida como modelo foi a da *Escherichia coli*, uma bactéria muito utilizada por pesquisadores e que possui estrutura perfeitamente conhecida. Várias propriedades da membrana (área por fosfolipídio, perfil da densidade eletrônica, parâmetro de ordem) estarão sendo monitoradas durante a equibração da membrana.