

264

**EFEITO DO DMSO NA HIDRATAÇÃO DO PAMITOL-OLEILFOSFATIDIL-GLICEROL E PAMITOIL-OLEIL-FOSFATIDIL-ETANOLAMINA.** *Emanuele Lazzaretti Cordova Campelo, Raquel da Silva Leviski, Paulo Fernando Bruno Gonçalves, Hubert Karl Stassen (orient.) (UFRGS).*

Através da metodologia de simulação computacional por dinâmica molecular, desenvolveu-se um estudo do efeito do Dimetilsulfóxido (DMSO) sobre os fosfolipídios Palmitoil-Oleil-Fosfatidil- Etalonamina (POPE) e Palmitoil-Oleil-Fosfatidil-Glicerol (POPG) em solução fisiológica. O DMSO possui várias aplicações em sistemas bio- e farmacológicos, pois têm a capacidade de penetrar em sistemas celulares sem causar danos significativos. Isto se deve a sua facilidade de aceitar ligações de Hidrogênio e a sua geometria relativamente pequena e compacta. A escolha dos fosfolipídios POPE e POPG se deve ao fato de serem os principais componentes de membranas de bactérias como a *E. Coli*, muito estudada e por isso adotada como modelo. Para comparar o efeito do DMSO sobre esses fosfolipídios, variou-se a proporção de Água/DMSO para observar a estruturação nos sistemas. Como principal recurso de análise de estruturação nos sistemas estudados utiliza-se uma Função de Distribuição Radial ( $g(r)$  ou RDF). Observou-se que o DMSO compacta a camada de solvatação da Água na parte hidrofílica dos fosfolipídeos e substitui moléculas de Água na vizinhança da parte hidrofóbica dos mesmos. (PIBIC).