

A protrombina é um importante zimogênio da cascata de coagulação, uma vez que sua forma ativa, a  $\alpha$ -trombina, é a principal enzima na conversão de fibrinogênio solúvel em monômeros insolúveis de fibrina, os quais se organizam como um tampão protéico que estabiliza a rede de plaquetas e contribui para o controle de processos hemorrágicos. O complexo protrombinase (formado pelo fator Xa, fator Va,  $\text{Ca}^{2+}$  e membrana de fosfolípídeos aniônicos) é essencial na ativação da protrombina, processo que culmina com a geração de  $\alpha$ -trombina e fragmento F1.2. Por ser substrato de uma reação enzimática, a protrombina tende a ser uma molécula muito flexível, fato que pode ser correlacionado com a falta de sua estrutura cristalográfica. Nesse contexto, esse trabalho emprega técnicas de modelagem comparativa, cálculos de *docking* e simulações de dinâmica molecular capazes de auxiliar na interpretação estrutural de suas funções biológicas em nível atômico para então ser empregada em futuros experimentos de desenvolvimento de novos agentes antitrombóticos. O modelo obtido indica a presença de movimentos de dobradiça entre os domínios e também foi possível observar uma alta flexibilidade em regiões da proteína, como seu *N*-terminal e algumas alças expostas, características que são associadas com especificidade e suscetibilidade a proteólise.

Apoio Financeiro: CNPq IM-INOVAR (420015/05-1), CNPq Universal (472174/2007- 0), CAPES e FAPERGS.