

447

ESTUDO CONFORMACIONAL E SIMULAÇÕES DE DINÂMICA MOLECULAR DE GALACTANAS E FUCANAS EM SOLUÇÃO AQUOSA. *Camila Franco Becker, Hugo Verli, Paulo Antônio de Souza Mourão, Jorge Almeida Guimaraes (orient.) (UFRGS).*

Galactanas e fucanas sulfatadas com potente atividade anticoagulante podem ser isoladas e caracterizadas de invertebrados marinhos. Estes polissacarídeos têm unidades repetitivas de oligossacarídeos simples, lineares e bem definidos. A atividade anticoagulante destes compostos é devida à potenciação da inibição da antitrombina sobre proteases da cascata de coagulação. Considerando a ausência de informações acerca da estrutura 3D destas moléculas, este trabalho objetiva analisar e descrever os perfis conformacionais da galactana e fucana, em solução aquosa, utilizando métodos de modelagem molecular (MM). Foram construídos mapas de energia para as ligações glicosídicas da galactana e fucana, em suas formas sulfatada e não-sulfatada, usando o campo de força GROMACS e cargas atômicas de Löwdin na base HF/6-31G**, através da rotação dos ângulos Φ e Ψ de 0° a 360° , em passos de 30° . O mínimo global obtido no mapa $\Phi - \Psi$ foi utilizado como geometria de referência de cada polissacarídeo sulfatado para a simulação de suas estruturas por dinâmica molecular (DM), em solução aquosa, usando o pacote GROMACS. Os mapas $\Phi - \Psi$ obtidos indicaram uma similaridade marcante entre as conformações de mínimo de energia para os polissacarídeos sulfatados e não-sulfatados da galactana e fucana. Os ângulos de diedro da ligação glicosídica sugeridos pelos mapas foram confirmados como as geometrias mais populosas após 3.0 ns de DM, indicando a descrição das prováveis conformações da galactana e fucana em solução aquosa. A observação da ausência de influência conformacional do grupo sulfato é de grande importância para o desenho de novos derivados sintéticos de galactanas e fucanas, já que isto indica uma baixa sensibilidade conformacional destes compostos à modificações químicas. Globalmente, nossos resultados mostram que os métodos de MM podem ser usados para descrever a conformação de polissacarídeos em solução aquosa. (PIBIC).