

Sessão 32  
Química e Física Teóricas

262

**SIMULAÇÕES DINÂMICA MOLECULAR DE OLIGOPEPTÍDEOS SIMILARES A PRIONS.**

*Igor Ribeiro Rosa, Paulo Augusto Netz (orient.) (ULBRA).*

Os prions celulares são moléculas de proteínas normais produzidas nas células dos mamíferos, através de controle dos genes. Quando a molécula adquire uma conformação diferente, ela se torna patogênica. Essa conformação pode ocorrer devido à existência de um gene mutante no indivíduo, que eventualmente desenvolve a doença, neste caso hereditária. Contudo, extratos de cérebro de animais doentes, contendo o prion mutante, quando injetados em outros animais podem causar a doença. Acredita-se, portanto, que os prions mutantes possam induzir os prions normais a mudarem de conformação molecular, num efeito cascata, permitindo o estabelecimento de doenças neurológicas como as encefalopatias espongiformes, que formam agregados insolúveis levando a demência, distúrbios motores e outras disfunções. Utilizando métodos computacionais de dinâmica molecular procuramos identificar a mudança na conformação em oligopeptídeo modelo, similar ao prion, com estrutura alfa-hélice para a forma de folha beta. O uso de um modelo simplificado permite a realização de simulações mais longas e a análise de eventuais fatores que possam favorecer a mudança conformacional. A dinâmica molecular, realizada com dois oligopeptídios, envolve o campo de força do GROMACS e o pacote GROMACS 3.2. (Fapergs).