



ciência desenvolvimento sociedade

XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

20 a 24 de outubro - Campus do Vale - UFRGS



Evento	Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2014
Local	Porto Alegre
Título	Biologia Estrutural de Prolil-4-Hidroxilases
Autor	ELISA BEATRIZ DE OLIVEIRA JOHN
Orientador	HUGO VERLI

Paredes celulares de plantas são estruturas complexas e dinâmicas, compostas principalmente por polissacarídeos e glicoproteínas. Glicoproteínas ricas em hidroxiprolina (HRGP) são encontradas na parede celular de plantas e algas verdes, e estão relacionadas ao crescimento e desenvolvimento das plantas. Prolil-4-hidroxilases (P4H) são enzimas que catalisam a formação pós-traducional da hidroxiprolina, a partir da prolina, e são essenciais para o crescimento das plantas, uma vez que a presença da hidroxiprolina define os sítios que sofrerão O-glicosilação posteriormente. Em *Arabidopsis thaliana*, existem pelo menos 13 tipos de P4Hs com diferentes perfis de expressão, e dois destes, P4H5 e P4H2 são os mais expressos em pelos radiculares, estruturas das plantas com um papel importante para a absorção de nutrientes. Apesar da sua importância para o desenvolvimento das plantas, as interações moleculares entre as P4Hs e os substratos com prolina ainda não são bem entendidas. Nesse contexto, o presente trabalho tem o objetivo de contribuir com conhecimentos sobre a biologia estrutural da interação das P4Hs e seus substratos com prolina, através de estudos de dinâmica molecular. Diferentes modelos da enzima P4H5 foram construídos através de modelagem comparativa a partir de dados experimentais obtidos em banco de dados, e, após validação, cinco deles foram escolhidos, um da enzima livre e quatro de diferentes posições do peptídeo acopladas à enzima. Foram feitas simulações de dinâmica molecular com os modelos selecionados, utilizando o campo de força GROMOS96 43A1 do pacote de simulação GROMACS, com o sistema solvatado com água e contra-íons numa caixa triclínica submetida a condições periódicas de contorno, temperatura de 310K e pressão de 1 bar. Foram feitas diversas análises com os dados das simulações de dinâmica, e os principais resultados obtidos indicam que a associação do peptídeo que simula a extensina estabiliza a estrutura da proteína, como observado através da análise de RMSD. Outras análises também indicam que alguns resíduos de prolina tem precedência sobre outros durante a catálise pela P4H5. Espera-se que estes resultados contribuam com o conhecimento da biologia estrutural da interação de P4H5 com seu substrato.