

SALÃO DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXIX SIC

UFRGS
PROPESQ



múltipla 
UNIVERSIDADE
inovadora  inspiradora

Evento	Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2017
Local	Campus do Vale
Título	DESENVOLVIMENTO DE UM PROTOCOLO PARA OTIMIZAÇÃO DA TERMORRESISTÊNCIA DE PROTEÍNAS COM APLICAÇÃO BIOTECNOLÓGICA E INDUSTRIAL
Autor	FELIPE CASTRO NEPOMUCENO
Orientador	HUGO VERLI

DESENVOLVIMENTO DE UM PROTOCOLO PARA OTIMIZAÇÃO DA TERMORRESISTÊNCIA DE PROTEÍNAS COM APLICAÇÃO BIOTECNOLÓGICA E INDUSTRIAL

Felipe Castro Nepomuceno, Hugo Verli
Departamento de Biologia Molecular e Biotecnologia
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

O uso industrial e biotecnológico de enzimas esbarra na sensibilidade destas moléculas a ambientes distintos daqueles onde são encontradas na forma nativa. Para contornar esta limitação, diversos esforços vêm se somando na busca por organismos extremofílicos, cujos aparatos moleculares apresentariam maiores chances de resistência a ambientes químicos extremos. Contudo, essa busca por enzimas esbarra na sua pré-existência na natureza, e num árduo processo de tentativa e erro. Uma estratégia alternativa é engenharia de proteínas, criando novas proteínas ou aprimorando as já conhecidas para condições de processos industriais. Nesse contexto, o presente projeto visa desenvolver e validar um protocolo de otimização de enzimas para atuarem em temperaturas extremas, usando como modelos iniciais a papaína de *Carica papaya* e a Estafopáina de *Staphylococcus aureus*, por serem modelos que apresentam termorresistência e não apresentam, respectivamente. O protocolo proposto envolve uma série de simulações por dinâmica molecular das enzimas, visando localizar possíveis pontos de (des)estabilização na estrutura proteica quando submetidas a aquecimento (através do uso do cálculo de contatos nativos), bem como a visualização de uma alteração na curva de desnaturação, posto que a papaína possui uma termorresistência maior quando comparada com a estafopáina. Devido ao fato de o protocolo visar um procedimento rápido, dinâmicas de curto tempo (5ns) foram aplicadas e temperaturas diferentes, uma temperatura de acordo com a nativa das proteínas e outra extrema, para que seja possível obter a desnaturação. Até o momento, foi possível caracterizar adequadamente a estabilidade associada à temperatura, mostrando a qualidade da análise de contatos nativos como avaliação da desnaturação. A partir disso, o cálculo de contatos nativos para cada resíduo dos modelos será feito, a fim de identificar as regiões relacionadas a termoestabilidade. Aplicando esse conhecimento em outros modelos proteicos, seria possível identificar pontos que estejam ligados a termorresistência da proteína e, dessa forma, tentar mutá-los, testando o modelo gerado quanto a sua adequação às altas temperaturas.