

109

SIMULAÇÃO DE MOLÉCULAS COM POTENCIALIDADE FARMACOLÓGICA EM MEMBRANAS. *Elisa Bielscki, Hubert Karl Stassen (orient.) (UFRGS).*

O estudo das interações entre fármacos e membranas é de grande importância no desenvolvimento de medicamentos e na elucidação do mecanismo de ação destes. A atividade de um fármaco depende do contato com membranas celulares, pois a ação de um composto é consequência da relação que este estabelece com determinadas células. A melitina é um pequeno peptídeo tóxico presente em grande quantidade no veneno das abelhas. É composto por 26 resíduos de aminoácidos, na sequência GIGAVLKVLTTGLPALISWIKRKRQQ, o que lhe confere carga +5. Sabe-se que este peptídeo é capaz de interagir com membranas, induzindo aumento da permeabilidade das mesmas e consequente desestruturação. Seu mecanismo de ação ainda não está bem elucidado, mas acredita-se que possua atividade antibacteriana e que esta ocorre quando o peptídeo está organizado na forma de tetrâmeros possivelmente formando um poro. O presente trabalho tem como objetivo caracterizar o efeito da melitina sobre uma membrana aniônica constituída pelos fosfolipídios Palmitoil-Oleil- Fosfatidil-Etalonamina (POPE) e Palmitoil-Oleil-Fosfatidil-Glicerol (POPG) em meio aquoso sob condições fisiológicas. Para isto, utilizou-se a metodologia de simulação computacional por dinâmica molecular, aplicando o software GROMACS e o campo de força GROMOS, e investigou-se propriedades como o parâmetro de ordem da membrana, a área de superfície por fosfolipídio, o perfil de densidade eletrônica e funções de distribuição para distâncias interatômicas. A comparação dos resultados obtidos com uma membrana aniônica não perturbada permite extrair conclusões sobre o efeito da molécula adicionada. (PIBIC).