

A membrana celular é a interface entre o os meios externo e interno de uma célula. Um dos componentes principais da membrana são os fosfolipídio que possuem uma cabeça polar e uma região apolar. A atividade de fármacos antimicrobianos é o resultado da interação destes com a membrana celular e seu estudo é de grande importância na elaboração de medicamentos. A moricina, um polipeptídeo com 42 aminoácidos isolado do bicho-da-seda – possui atividade bactericida comprovada. O objetivo desse estudo é elucidar a interação desta proteína pequena com uma membrana hidratada composta por Palmitoil-Oleil-Fosfatidil-Colina (POPC) utilizando metodologia de simulação computacional por Dinâmica Molecular. Empregou-se o tratamento por Coarse-Graining (CG) dentro da filosofia do campo de força Martini. Desenvolveu-se quatro simulações diferentes: i) Um heptâmero de moricina inserido na membrana; ii) Associação de moléculas de moricina e de fosfolipídios em água partindo de uma mistura randômica; iii) Aproximação de oligômeros de moricina em solução fisiológica à membrana; iv) Aproximação de um dímero de moricina com dinâmica forçada a membrana. Todas as simulações e análises (Desvio padrão quadrático médio das coordenadas das moléculas de moricina, distâncias entre moléculas de moricina e o centro da membrana, energias de interação, perfil de densidade eletrônica) foram realizadas com o software GROMACS. Os oligômeros de moricina foram obtidos pela simulação de oito monômeros de moricina. Cada oligômero obtido foi caracterizado através de simulações independentes por, em média, 1900 ns sem se observar a inserção ou ancoramento da proteína por sobre a membrana. Apenas o item i) resultou em um sistema equilibrado contendo moricina dentro da bicamada fosfolipídica.