

119

**CARACTERIZAÇÃO DO RECONHECIMENTO MOLECULAR DO PEPTÍDEO  $\alpha$ 1E2 DE HPV PELO DNA.** *Guilherme Menegon Giesel, Luis Mauricio Trambaioli da Rocha e Lima, Joana Faber-Barata, Hugo Verli, Jorge Almeida Guimaraes (orient.) (UFRGS).*

A regulação da transcrição depende da ligação sítio-específica de proteínas regulatórias, sendo controlada pelas bases, pela flexibilidade e pela curvatura intrínseca de seqüências específicas do DNA. Em HPV, um dos agentes protéicos responsáveis por este processo é a proteína E2, a qual realiza contatos diretos com a fenda maior do DNA (seqüência ACCG-N<sub>4</sub>-CGGT) através da região 294-311 ( $\alpha$ 1E2). Neste contexto o objetivo deste trabalho é a caracterização, através do uso de técnicas de dinâmica molecular (DM), do reconhecimento molecular do peptídeo  $\alpha$ 1E2 pelo DNA. A metodologia empregada incluiu simulações de DM do peptídeo  $\alpha$ 1E2 não complexado e em complexo com a região específica de ligação ao DNA. Ambas as simulações tiveram duração de 30 ns, com uso do pacote GROMACS e do campo de força OPLS/AA. Os dados obtidos demonstram que  $\alpha$ 1E2 é parcialmente desenovelado em solução. Contudo, tal perda de estrutura secundária parece não ocorrer quanto o peptídeo está complexado ao DNA, indicando que a ligação ao ácido nucléico é a força motriz para o enovelamento da seqüência peptídica em questão. Essas observações ilustram que a ligação ao DNA envolve um processo do tipo encaixe induzido, demonstrando ainda a possibilidade de observação do dobramento de proteínas e seus mecanismos de reconhecimento utilizando ferramentas de modelagem molecular. (BIC).