



T670

PREDIÇÃO CONFORMACIONAL DE ENZIMA POR MODELAGEM MOLECULAR

Ricardo Romero de Sousa (Bolsista SAE/PRG) e Prof. Dr. Rubens Maciel Filho (Orientador),
Faculdade de Engenharia Química - FEQ, UNICAMP

O objetivo principal deste trabalho é verificar a influência da temperatura na conformação da α -amilase durante o processo de secagem por atomização, secagem a frio e através de dados experimentais e predições por modelagem molecular. Isto permite verificar mudanças estruturais devido a perda de atividade parcial ou total durante qualquer um dos processos de secagem como também investigar, através de simulação quais são as melhores condições de pressão e temperatura. Estudos em escala de bancada utilizaram a α -amilase do *Bacillus licheniformis* ATCC 2781. Os experimentos de atomização foram realizados com um spray dryer para a secagem a frio da enzima. As simulações foram realizadas através do programa de ECEPPAK para IBM-AIX. A estrutura terciária da α -amilase foi obtida usando-se o banco de dados SWISS PROT, no qual foi modelada a estrutura composta pelos 512 aminoácidos que existem nesta proteína. A estrutura minimizada característica foi quantificada através dos cálculos do RMSD (root mean squared deviation). A estrutura minimizada característica foi comparada com a estrutura original usando-se um PDB (banco de dados de proteína). O otimização completa foi realizada com os 483 resíduos que existem na cadeia. Através dos resultados obtidos foi possível verificar que a estrutura conformacional é fortemente influenciada pela temperatura mesmo para temperaturas relativamente baixas. A modelagem molecular mostrou ser muito eficiente para prever a temperatura que permite realizarmos os experimentos de secagem a frio de forma a preservar as propriedades desejadas da enzima. As predições por modelagem mostraram uma concordância muito boa com os dados experimentais, o que nos permite concluir que pode ser usada como uma ferramenta na procura de condições operacionais como também para otimização de processo.

Simulação Molecular Estrutural - Modelagem Conformational - α -amylase