



E0462

### **DINÂMICA MOLECULAR DE BIOMOLÉCULAS EM SOLUÇÃO AQUOSA**

Érica Teixeira Prates (Bolsista FAPESP) e Prof. Dr. Munir Salomão Skaf (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A proposta inicial deste trabalho é o estudo das propriedades estruturais de solvatação, ligações de hidrogênio soluto-solvente e da dinâmica reorientacional das moléculas de água nas vizinhanças dos solutos através de simulações computacionais por dinâmica molecular (MD). A importância deste assunto se deve a no mínimo dois fatores: apesar de suas moléculas serem estruturalmente simples, a água líquida possui características peculiares e intrigantes, relacionadas à sua habilidade singular de fazer simultaneamente quatro ligações de hidrogênio, em conjunto com sua baixa massa molecular e aos pequenos momentos de inércia; a água é encontrada em abundância ao redor de biomoléculas como carboidratos e proteínas, controlando sua estrutura, função e reatividade em sistemas biológicos. Um dos resultados obtidos neste projeto é a quantificação de interações por ligações de hidrogênio entre as moléculas de água e as hidroxilas de moléculas de frutose, verificando que se define uma conformação para este açúcar que é totalmente distinta de sua estrutura não solvatada. Também foi observado que moléculas de água ligadas apresentam uma dinâmica translacional e rotacional mais lenta que as moléculas "livres". O estudo prossegue com oligossacarídeos de glicose, as maltodextrinas, e peptídeos em solução aquosa.

Dinâmica molecular - Carboidratos - Solvatação