



E0444

ANÁLISE DE PROPRIEDADES DINÂMICAS E CONFORMACIONAIS DE HOMOPEPTÍDEOS EM ÁGUA ATRAVÉS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

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

Este trabalho consiste no estudo, através do método de Dinâmica Molecular, dos efeitos das interações intra e intermoleculares de soluções aquosas de oligoalaninas (A, AA e AAAA) em suas propriedades estruturais e dinâmicas observáveis experimentalmente. Exemplo da relevância deste assunto é a conexão entre o processo de desnaturação e os segmentos protéicos formados por uma seqüência de aminoácidos repetidos. Ainda, peptídeos têm sido um constante recurso adotado no estudo do enovelamento protéico para substituir a simulação de proteínas, de alto custo computacional. Foram, então, construídos sistemas de soluções aquosas de A, AA e AAAA, alterando e fixando fatores como concentração molar, massa total e propriedade anfotérica do soluto. Análises conformacionais e de estatística de ligações de hidrogênio (LH) foram úteis para explicar detalhes das curvas de função de correlação reorientacional e os respectivos valores de tempo de reorientação, análogo aproximado do tempo de relaxação dielétrica. Uma das conclusões é a de que massa molecular, volume, momento de dipolo do soluto e, principalmente, número de LH com moléculas de água devem ser considerados em conjunto para interpretar as propriedades dinâmicas destas soluções.

Peptídeo - Solução aquosa - Simulação computacional