

### **MODELAGEM CONFORMACIONAL DA ENZIMA $\alpha$ -AMILASE: ESTUDOS PRELIMINARES**

Fábio Nicolich Shimono (Bolsista SAE/UNICAMP), Sérgio Santos de Jesus (co-orientador) e Prof. Dr. Rubens Maciel Filho (Orientador), Faculdade de Engenharia Química - FEQ, UNICAMP

Recentes avanços na engenharia genética tem aumentado o interesse em pesquisas relacionadas com a conformação proteica. A habilidade em predizer estas estruturas é de grande interesse teórico, especialmente nos ramos da bioquímica e da biofísica. Entre as enzimas utilizadas industrialmente merece destaque as  $\alpha$ -amilase, elas são utilizadas nas industriais de alimentos, farmacêutica e têxteis. Devido a sua grande importância não só a nível industrial mais também a nível hospitalar, pois também são utilizadas em testes de análises clínicas para verificação de distúrbio pancreático (pancreatite aguda), este trabalho teve como objetivo estudar a energia conformação da enzima  $\alpha$ -amilase em função da pressão e da temperatura. Para o presente estudo utilizou-se o programa ECEPPEK e  $\alpha$ -amilase de *Bacillus licheniformis*. Através dos resultados obtidos por simulação observou-se uma energia livre de aproximadamente  $-13.000$  kcal/mol para a forma mais estável, foi verificado também que a pressão e a temperatura também influi na sua estrutura conformacional.

Modelagem conformacional -  $\alpha$ -amilase - Energia livre