

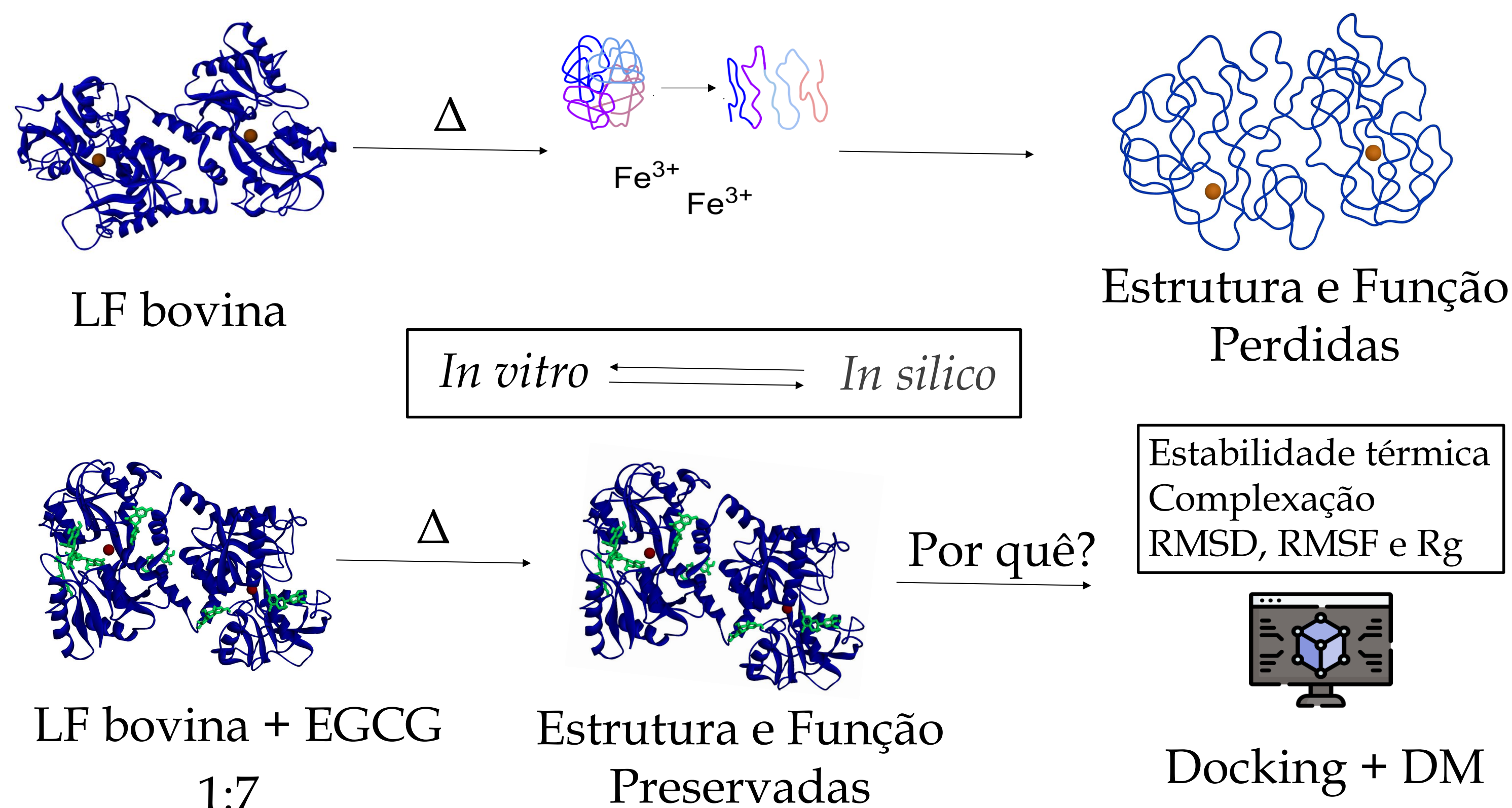
Estudo de complexos lactoferrina/epigallocatequina-3-galato (LF/EGCG) por meio de modelagem molecular computacional

Gabriel Fernandes Sequine; Celine Amaral Melo; Thomás Valente de Oliveira; Eduardo Basílio de Oliveira

Dimensões Ambientais: ODS 9

Categoria: Pesquisa

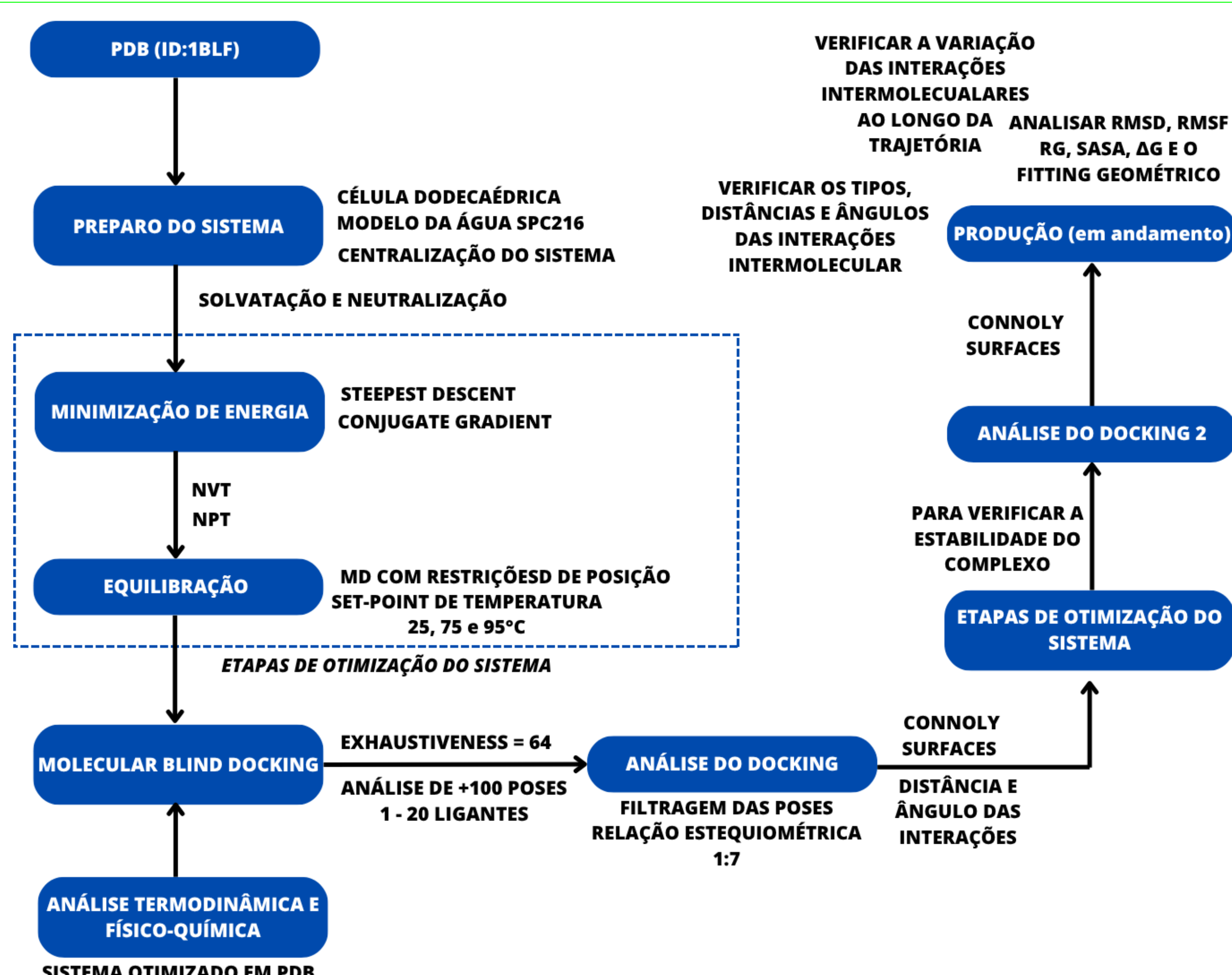
Introdução



Objetivos

- Elucidar o mecanismo molecular de termoe estabilização da LF pela EGCG utilizando uma abordagem *in silico* de docking e dinâmica molecular (DM).
- Quantificar o efeito termoe estabilizador, analisando o fitting geométrico dos sítios, a dinâmica estrutural (RMSD, RMSF) e a energia de binding (ΔG) do complexo sob estresse térmico.

Material e Métodos ou Metodologia



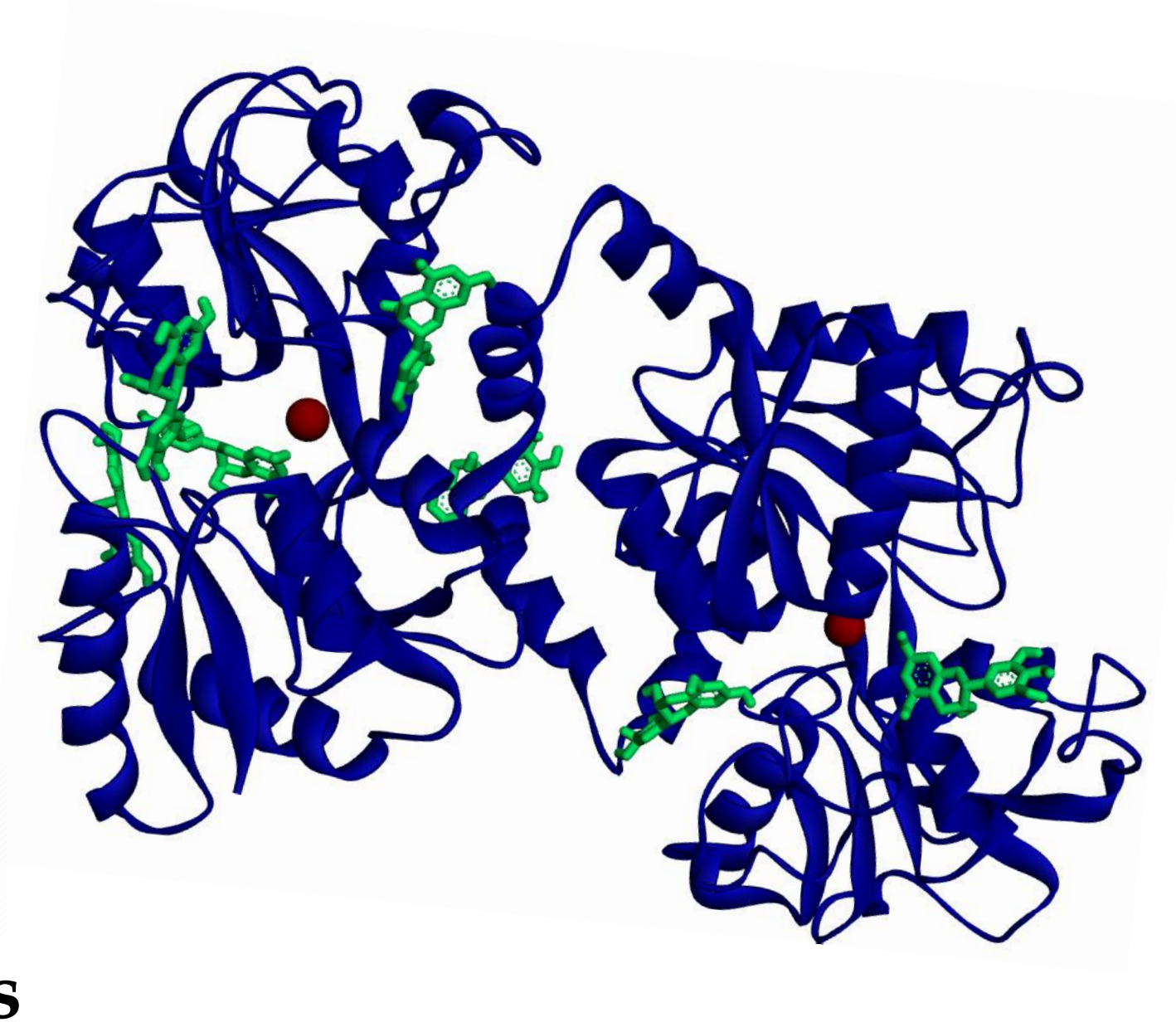
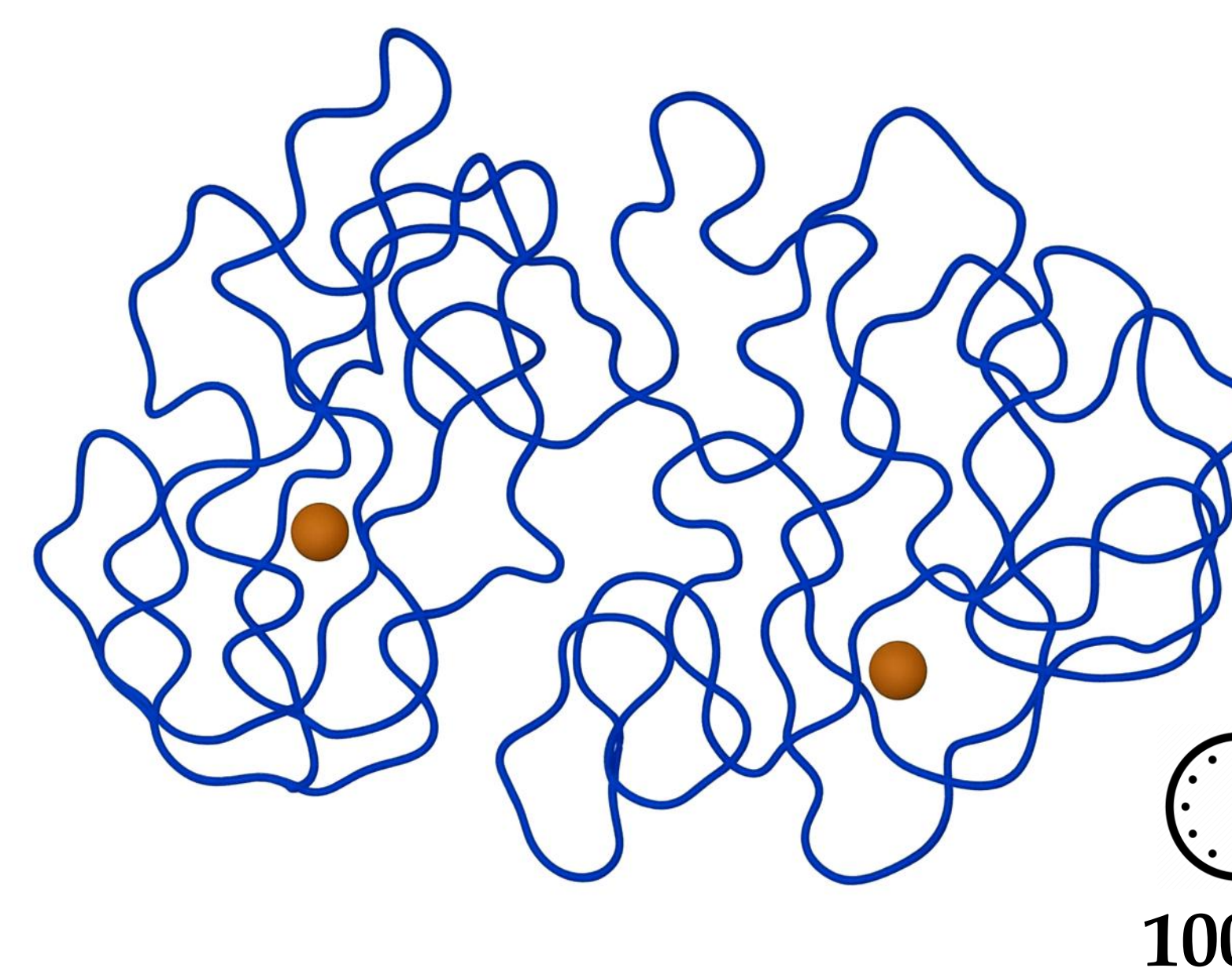
Apoio Financeiro



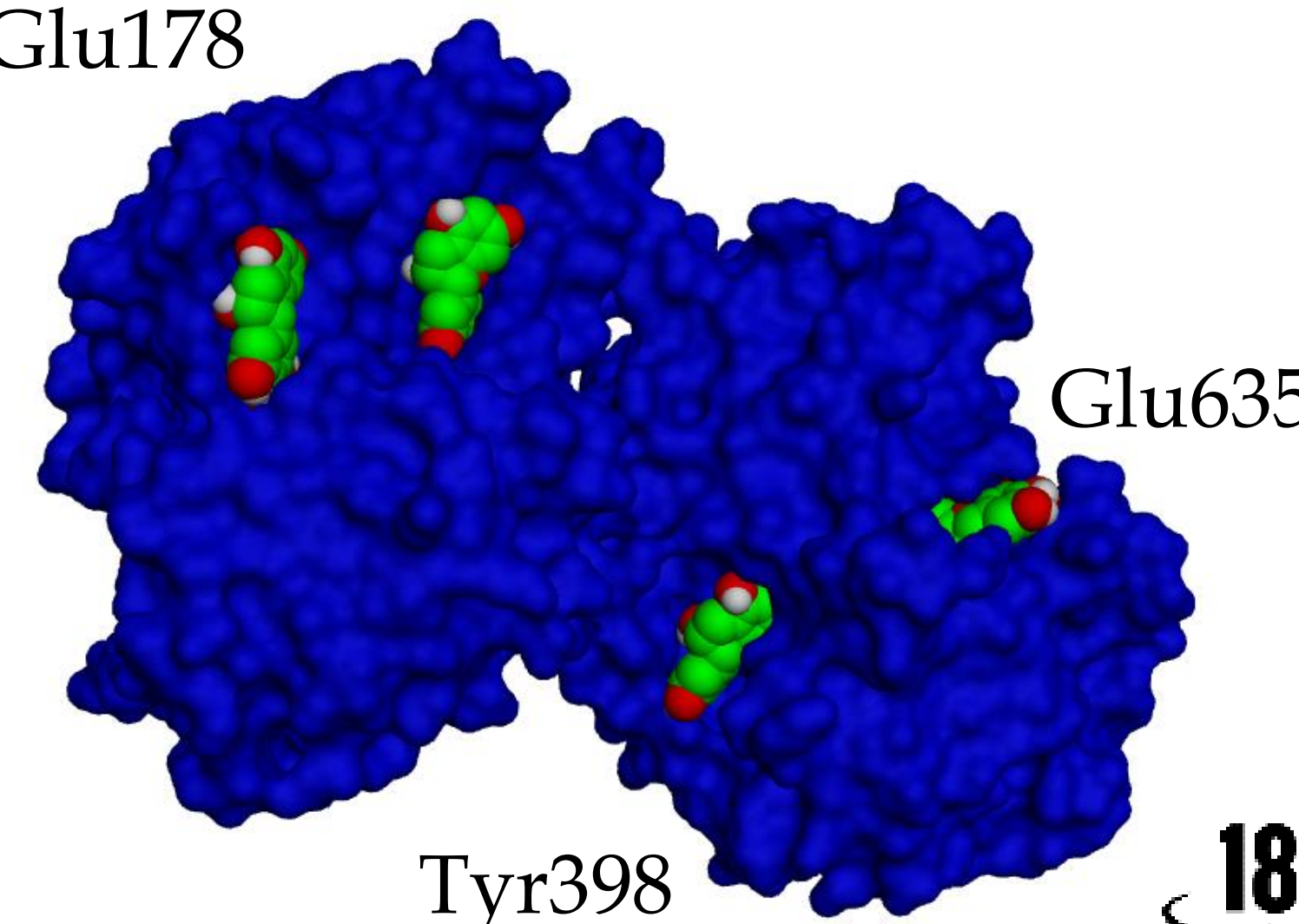
Resultados e/ou Ações Desenvolvidas

LF bovina "desnaturada" (85°C)
RMSD >> 5

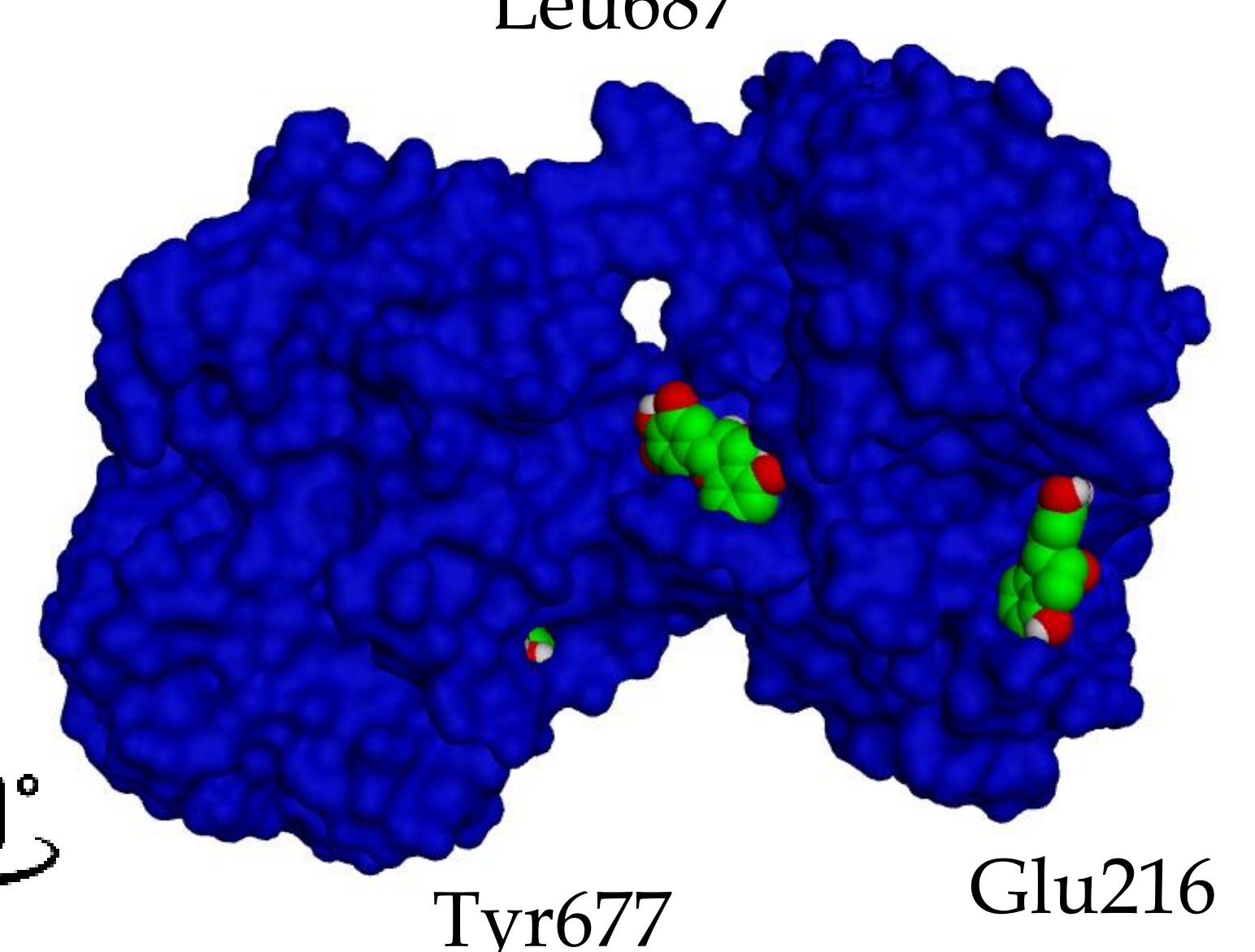
LF bovina + EGCG (85°C)
RMSD < 6



Glu178
Glu66



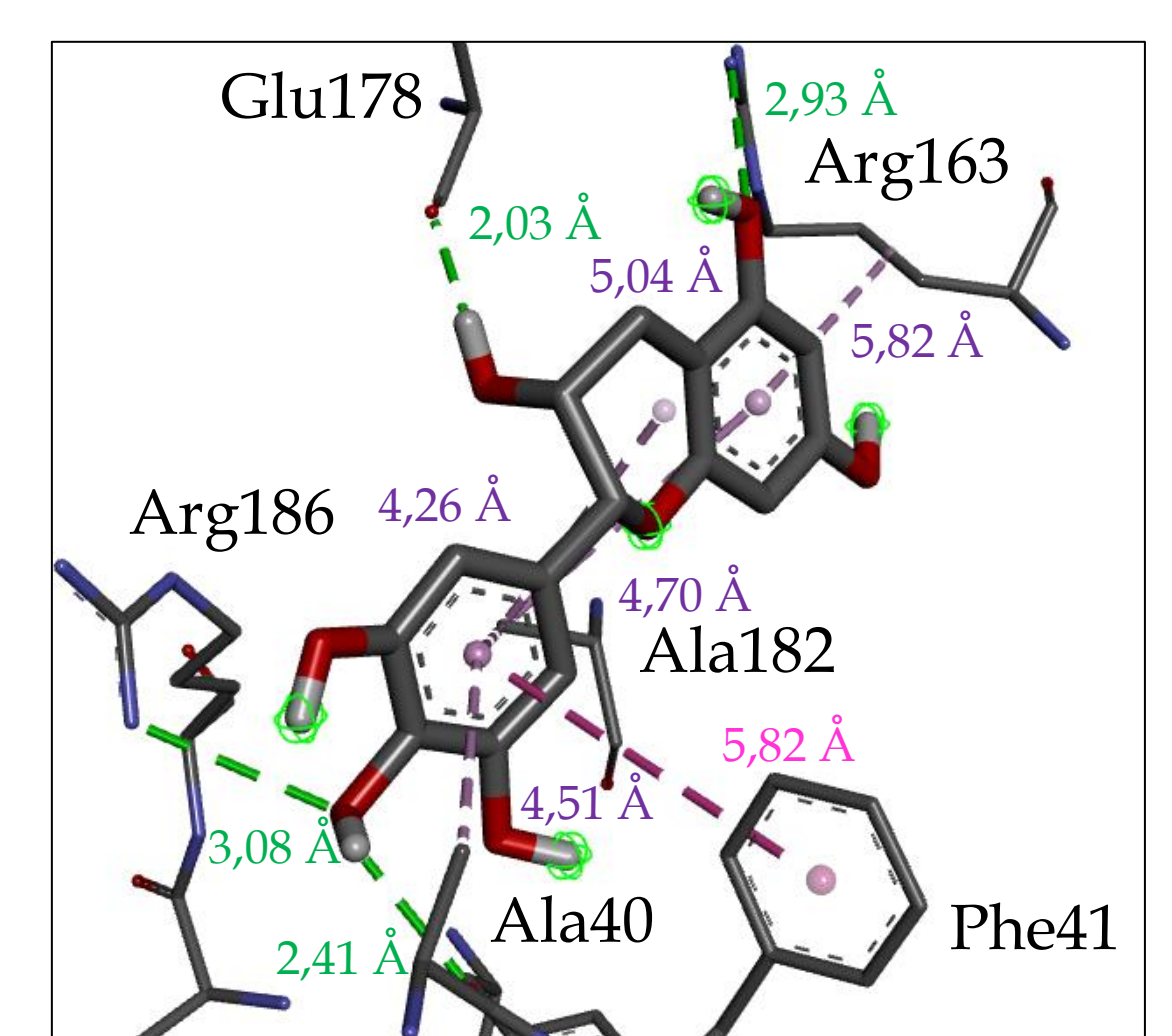
Leu687



Distância média das ligações-H (Å) pelo tempo de produção
T = 25°C

Sítio (qtd)	0ns	50ns	100ns
Glu178 (4)	2,61	2,65	2,52
Glu66 (5)	2,67	2,76	2,71
Tyr398 (3)	2,02	1,98	1,92
Glu635 (5)	2,97	2,71	2,65
Leu687 (4)	3,33	3,16	3,04
Tyr677 (4)	3,08	2,98	3,03
Glu216 (5)	2,98	3,03	3,05

Glu178, T = 25°C, 0ns



Conclusões

- EGCG interage fortemente, por meio de ligações-H, com a LF em sete sítios distintos, em contraste aos mais de vinte sítios identificados pela literatura.
- Simulações de DM iniciais confirmam que esta complexação resulta em um sistema estruturalmente mais estável e rígido.
- Abordagem *in silico* forneceu um modelo atômico detalhado que explica o mecanismo de termoe estabilização, antes apenas observado empiricamente.
- Concluir as simulações de DM para quantificar o efeito da temperatura na flexibilidade (RMSF) e energia de binding (ΔG).