

ESTUDOS IN SILICO COM A HEMEPROTEÍNA HGBI DA BACTÉRIA EXTREMÓFILA METHYLACIDIPHILUM INFERNORUM

Leonardo Alves Linhares, Geancarlo Zanatta, Eduardo H S Sousa, Eduardo Henrique Silva de Sousa

Durante décadas, as proteínas de microrganismos extremófilos vêm fascinando a comunidade científica, que busca compreender sua robustez bem como desenvolver bioprodutos. A hemeproteína Hell's gate I (HGbl) foi identificada no extremófilo *Methylophilum infernorum*, tendo sido selecionada para estudos in silico da sua possível interação com aminoácidos via docking molecular. Empregou-se nesse estudo os softwares de modelagem molecular AutoDock 4.2, UCSF Chimera e Avogadro. A estrutura cristalográfica da proteína estudada foi obtida no banco de dados PDB (3S1J), na forma de um dímero/monômero cujo o ferro do grupo heme do sítio ativo encontra-se ligado a uma molécula de acetato, enquanto os aminoácidos foram obtidos através do banco de dados de moléculas PubChem. Nesses estudos, utilizou-se uma unidade da proteína, livre do ligante acetato, moléculas de água e sais de cristalização, tendo sido protonada usando o PROPKA, via servidor PDB2PQR, utilizando-se o campo de força Charmm. A carga do grupo heme foi calculada externamente e editada manualmente no arquivo .pdbqt da proteína. A geometria dos aminoácidos foi otimizadas utilizando-se o campo de força MMFF94 usando gradientes conjugados via Avogadro. A preparação dos ligantes, da proteína e a criação dos inputs no AutoDock 4.2 deu-se de forma padrão. Os resultados mostraram que todos os 20 aminoácidos acessam o sítio ativo da proteína e 9 apresentam interação similar àquela presente na estrutura cristalográfica em termos de distância de ligação, 2.0 Å, e estabilização do acetato pelos resíduos de tirosina (T29) e glutamina (Q50). Destacam-se alanina, glicina e serina que apresentaram valores estimados de energia livre de ligação entre -3.00 e -4.00 kcal mol⁻¹ e distâncias de ligação flutuantes entre 1.8 e 2.0 Å. Assim, podemos sugerir que deve haver interação entre os aminoácidos e a hemeproteína estudada. Esses resultados abrem caminho para estudos mais robustos envolvendo dinâmica molecular e cálculo DFT.

Palavras-chave: HEMEPROTEÍNAS. AMINOÁCIDOS. DOCKING MOLECULAR. MODELAGEM MOLECULAR.