

Interações da proteína ligante de ácidos graxos (FABP) de cérebro humano com modelos de membrana

Carolina Gimenes Oliveira¹; M. Batista²; A. J. Costa-Filho³;

¹Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, Brasil.

²Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras, Ribeirão Preto, Brasil.

Introdução: FABP (*fatty acid binding protein*) são proteínas ligantes de ácido graxo que foram descritas pela primeira vez em 1972 por Ockner. Compreendem uma família de proteínas citoplasmáticas pequenas (14-16 kDa) com participação em diversos processos, especialmente aqueles envolvidos no transporte de ácidos graxos e lipídeos. A principal função das FABPs é ligar reversivelmente e transportar ligantes hidrofóbicos como ácidos graxos saturados e insaturados de cadeia longa, que fazem parte de um complexo balanço de processos como armazenamento de energia, expressão gênica, crescimento celular, síntese de membranas, respostas inflamatórias e metabólicas, atividade de canais iônicos e receptores, assim como podem modificar a estrutura de proteínas de membranas.

Métodos: Primeiramente a metodologia baseou-se em aprender a trabalhar com o software VMD para visualização das proteínas e membranas, e o programa NAMD para a realização das simulações propostas no projeto. Após ter sido realizado os tutoriais dos programas anteriores, deu-se início as etapas de simulações, o qual foi utilizado um computador local com 8 processadores, e placa gráfica que permitiram as simulações.

Resultados e Discussões: A etapa de equilíbrio da proteína foi dado início logo após a preparação e solvatação da proteína B-FABP. O programa utilizado para rodar essa simulação foi o NAMD e utilizamos um arquivos de configuração para fazer os primeiros preparos como minimização do sistema, temperatura e o quanto de frames (*first time step*). Abaixo o gráfico de RMSD da proteína B-FABP:

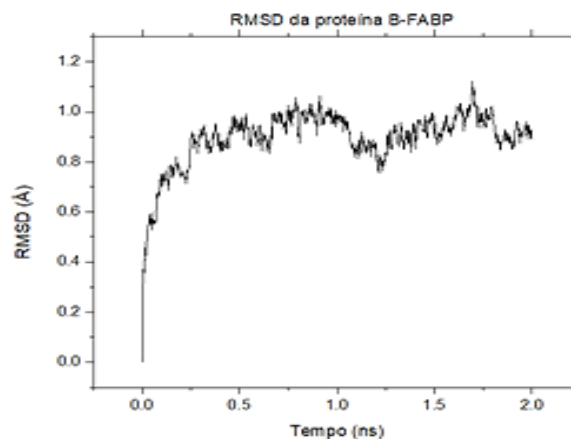


Figura 1: RMSD da cadeia principal da proteína B-FABP.

O gráfico acima apresenta a curva característica de um sistema equilibrado de simulação dinâmica, onde a partir de um valor RMSD a curva começa a ficar constante, indicando que o sistema está equilibrado, assim como um primeiro objetivo, conseguimos equilibrar o sistema de proteína. Os próximos passos foram definir os tipos de membranas que iríamos simular juntamente com a proteína.

Conclusões: O trabalho em questão deteve-se no estudo de simulações dinâmicas de proteínas e membranas, com o intuito de aprendizado da utilização dos programas, o qual foi obtido sucesso visto que, a proteína foi equilibrada. Posteriormente essas simulações servirão de base para novos projetos com proteínas já estudadas pelo grupo.