

BIOMEDICINA

PROJETO DE INVESTIGAÇÃO CIENTÍFICA: Modelagem computacional de proteínas associadas à resistência a inseticidas em *Anopheles darlingi* encontrado na região amazônica

COORDENADOR: Adonis de Melo Lima

PLANO DE TRABALHO: Dinâmica molecular da proteína glutathione-s-transferase classe delta associada à resistência a inseticidas em *anopheles darlingi* encontrado na região amazônica.

ALUNO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA: Marina Luiza Saraiva Moller

CURSO: Bacharelado em Biomedicina

O objetivo geral do trabalho foi modelar e validar computacionalmente a estrutura da Glutathione S – transferase classe delta *Anopheles darlingi* encontrado na região amazônica. A região Amazônica possui uma imunização reduzida, decorrente dos aspectos climático-ambientais e condição de vida da população, bem como a resistência do mosquito contra inseticidas. Uma das formas de controle do vetor é realizada por meio da utilização de inseticida de ação residual, o Dicloro-Difenil-Tricloroetano (DDT). São imprescindíveis as técnicas de modelagem e validação computacional para elucidarmos a conformação da classe delta sendo a mais importante das GSTs. Partindo dos valores obtidos para a validação e dinâmica molecular, é possível afirmar que se obteve um bom modelo para análise do sítio de ligação com o cofator GSH. A dinâmica possibilitou um refinamento do modelo melhorando as distâncias entre a GST e seu cofator. O scan de alanina sugere a valina na posição 65 como o aminoácido que mais contribui energeticamente com a interação GST-GSH. Tal evidência o destaca como candidato mais relevante a uma mutação, para que se diminua a interação e com isso impeça o processo de desintoxicação realizado pelo organismo do mosquito.

PALAVRAS-CHAVE: *Anopheles darlingi*; *plasmodium*; hemoparasitaria.

PROJETO DE INVESTIGAÇÃO CIENTÍFICA: Validação de métodos de investigação de parasitos em amostras de polpas de frutas

COORDENADOR: Roberta Danyele Oliveira Raiol

PLANO DE TRABALHO: Validação de métodos de investigação de parasitos em amostras de polpas de cupuaçu

ALUNO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA: Lorena Souza Costa

CURSO: Bacharelado em Biomedicina

As doenças veiculadas por alimentos representam um importante problema de saúde pública. A transmissão dá-se por via oral, por meio da ingestão de água ou alimentos contaminados por estruturas parasitárias. O consumo de frutas proporciona importantes benefícios à saúde. Nesse sentido, há um estímulo para que esses alimentos sejam consumidos, sobretudo na forma *innatura*. Segundo a Legislação Brasileira do Ministério da Agricultura (Instrução Normativa nº 01, 07/01/2000), a “polpa” é um produto não fermentado, não concentrado, não diluído, obtido pelo esmagamento de frutos polposos, sendo nesse processamento incluso o esmagamento de sua casca. A agroindústria de frutas, em Belém, teve início na fabricação de doces, geleias e compotas de frutas nativas da Amazônia. Inicialmente, as frutas que tiveram seu processo de beneficiamento foram o maracujá, cupuaçu e acerola. O presente estudo visou a criar um *checklist* dos parasitas encontrados em polpas comercializadas. Foram analisadas amostras de polpas de cupuaçu comercializadas em supermercado e amostras oriundas de feiras na região Metropolitana de Belém. Foram utilizados os métodos Hoffman e Pons&Janer (Sedimentação Espontânea) – e de sedimentação por centrifugação. Todas as amostras apresentaram aspecto satisfatório quanto à cor, ao odor, à aparência, mostrando-se também livre de contaminação.

PALAVRAS-CHAVE: Frutas; Polpa; Cupuaçu; Parasitas.

PROJETO DE INVESTIGAÇÃO CIENTÍFICA: Otimização *in silico* do fármaco anticancerígeno L-Asparaginase

COORDENADOR: Ronaldo Correia da Silva

PLANO DE TRABALHO: Modelagem molecular da enzima L-Asparaginase de uma linhagem de cianobactérias através de ferramentas de bioinformática.

ALUNO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA: Maryene Wilde Alves Melo

CURSO: Bacharelado em Biomedicina

As asparaginases são enzimas responsáveis pela catálise da reação de hidrólise do aminoácido L-asparagina, que resulta na produção de ácido aspártico e amônia. As L-Asparaginases obtidas a partir de cianobactérias e de certos fungos têm sido negligenciados, embora possuam enorme potencial para o desenvolvimento de novas drogas (Abed *et al.*, 2008; Rastogi & Sinha, 2009), especialmente à luz da biologia sintética. Os estudos de modelagem e docagem molecular no desenho racional de fármacos podem ser uma importante estratégia para a otimização de L-asparaginases utilizando métodos computacionais, reduzindo tempo e recursos financeiros. O objetivo do trabalho foi utilizar ferramentas de bioinformática para construir um modelo teórico, da enzima L-Asparaginase de apenas uma linhagem de cianobactérias obtidas do Laboratório de Tecnologia Biomolecular/UFGA. Os principais resultados desejados, tais como, a criação de um modelo tridimensional por meio de modelagem por homologia, validação do modelo gerado por meio da qualidade estereoquímica, energia livre e a similaridade estrutural da proteína, foram alcançados. Somente o processo de docagem não foi realizado.

PALAVRAS-CHAVE: Enzima L-Asparaginase; Ácido aspártico e aminoácido. Modelagem e docagem.

PROJETO DE INVESTIGAÇÃO CIENTÍFICA: Modelagem molecular da proteína CovR da *Streptococcus mutans*: um promissor alvo contra cariogênese humana

COORDENADOR: Nelson Alberto Nascimento de Alencar

PLANO DE TRABALHO: Predição da estrutura tridimensional da enzima *smcovr* por meio da modelagem por homologia molecular

ALUNO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA: Amanda Letícia dos Santos Ferreira

CURSO: Bacharelado em Biomedicina

A cárie é uma doença multifatorial, infecciosa e transmissível, associada à presença bacteriana na colonização de superfícies dentais. Para causar infecção ou sobreviver na cavidade bucal, os microrganismos precisam aderir-se as superfícies, ou então serão removidos pelo contínuo fluxo salivar. O *Streptococcus mutans* (*S.m*) está associado à cárie em seres humanos e é considerado o microrganismo mais cariogênico de todos os estreptococos orais, é comumente associado a Endocardite Bacteriana sub-aguda, uma inflamação da camada interna do coração (endocárdio). Atualmente, foi demonstrado que o *S.m* induz cárie quando implantado em modelos animais experimentais e é um microrganismo cariogênico para todas as espécies de animais dentados até hoje testadas. Em *S.* A predição teórica da estrutura tridimensional da CovR é de suma importância para o estudo de sua inibição. O objetivo geral foi utilizar técnicas de bioinformática e homologia molecular para construir in silico o modelo tridimensional da proteína CovR da espécie *Streptococcus mutans* (UA159) e estudar as interações entre substratos e fármacos promissores, visando a contribuir com o entendimento da patogenicidade.

PALAVRAS-CHAVE: Modelagem molecular; Enzima *covr*; Espécie *Streptococcus mutans*.