

BIOMEDICINA

PLANO DE TRABALHO: Simulação molecular do ligante asparagina em l-asparaginase de *Erwinia carotovora* por meio de ferramentas de bioinformática

ALUNO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA: Liliane Rodrigues Garcia.

PROJETO DE INVESTIGAÇÃO CIENTÍFICA: Análise do potencial biotecnológico, farmacêutico e biomédico de enzimas l-asparaginases

COORDENADOR: Adonis de Melo Lima

CURSO: Biomedicina

PALAVRAS-CHAVE: Câncer; Proteobactéria; Cyanobacteria.

Considerando que a incidência e a mortalidade por câncer vêm aumentando em nível mundial, o objetivo deste Plano de Trabalho foi realizar análise *in silico* do potencial biotecnológico de asparaginases de *Escherichia coli* (Proteobactéria) e *Limnotrix* sp. CACIAM 69D (Cyanobacteria). Foi utilizado o programa de bioinformática Modeller 9v8. Os modelos gerados foram visualizados no programa Pymol: SWISS-MODEL; ProSA-web e proQ. A maioria dos aminoácidos (aa) da proteína molde se conservaram no modelo gerado, havendo apenas algumas trocas, em sua maioria, por aa de mesmo grupo físico químico. Os resultados foram promissores e garantem a continuidade dos estudos como a realização das etapas de docagem e dinâmica molecular.

PLANO DE TRABALHO: Modelagem molecular da enzima L-asparaginase por meio de ferramentas de bioinformática

ALUNO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA: Lis Mariana da Silva Menezes

PROJETO DE INVESTIGAÇÃO CIENTÍFICA: Análise do potencial biotecnológico, farmacêutico e biomédico de enzimas L-asparaginases

COORDENADOR: Adonis de Melo Lima

CURSO: Biomedicina

PALAVRAS-CHAVE: Câncer; Proteobactéria; Cyanobacteria.

O objetivo deste Plano de Trabalho foi analisar *in silico* o potencial biotecnológico de asparaginases de *Escherichia coli* (Proteobactéria) e *Limnospira* sp. CACIAM 69D (Cyanobacteria). A proposta pode ser importante para a otimização de L-asparaginases e montagem de sistemas biológicos. Os modelos foram gerados com o auxílio de um programa para visualização 3D, sendo utilizados o VMD (*Visual Molecular Dynamics*) e o *Pymol*. Os cinco modelos de proteína gerados passaram por um processo de validação, realizado nos sites: SWISSMODEL; PROSA; PROQ. Infere-se que a proteína gerada consegue atingir seu estado enzimaticamente ativo, realizando sua clivagem autoproteolítica de maneira completa, sendo o modelo “alvo1.pdb” é um possível candidato a fármaco para tratamento de tumores malignos.