

080

ESTUDO DE DINÂMICA MOLECULAR DA QUIMOSINA BOVINA. *Misael Schleger, Jorge Guimarães (orient.) (UFRGS).*

A quimosina é uma aspártico protease presente na mucosa gástrica de mamíferos lactantes e usada há séculos na manufatura de queijos. Sua principal função é clivar a k-caseína que, com a perda de um segmento, coagula. Estudos prévios do nosso grupo de pesquisas permitiram a identificação de uma isoforma mutante da quimosina (S79N), a qual apresenta atividade catalítica reduzida em relação a isoforma nativa. Neste contexto, este trabalho tem como objetivo o estudo das razões moleculares que levam a diferentes atividades catalíticas da quimosina e sua isoforma mutante através de simulações de dinâmica molecular (DM). A estrutura cristalográfica da quimosina nativa foi obtida do Protein Data Bank (1CZI). A enzima foi mutada no programa SPDBV e posteriormente solvatada utilizando o modelo de água SPC. As simulações de DM das formas selvagem e mutante foram realizadas no pacote GROMACS por 4 ns. As simulações foram estáveis, não apresentando instabilidades na estrutura secundária das proteínas. Contudo, a região do flap delimitado pelos resíduos Pro71 e Ile83 apresentou aumento da mobilidade na forma mutante. Esta região, vizinha ao sítio catalítico, pode controlar a acessibilidade do substrato para a catálise, sendo possivelmente responsável pela redução na atividade catalítica na forma mutante. A compreensão das propriedades moleculares da quimosina e de outras enzimas aplicadas no processamento de alimentos está diretamente relacionada ao melhoramento dos processos biotecnológicos, permitindo o desenho racional de novas enzimas progressivamente mais eficientes. (BIC).