



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
Título	Simulação computacional da interação entre hidroxiapatita e biomoléculas
Autor	MIGUEL BARBEDO ZACOUTEGUY
Orientador	PAULO AUGUSTO NETZ

Aluno: Miguel Barbedo Zacouteguy
Orientador: Prof. Dr. Paulo A. Netz
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Simulação computacional da interação entre hidroxiapatita e biomoléculas

Hidroxiapatita, objeto de estudo computacional em questão, é um mineral ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) da família dos fosfatos de cálcio presente no esmalte dentário. Estudos recentes mostram uma relação do aumento da concentração de algumas proteínas da película adquirida do esmalte dentário que se ligam à hidroxiapatita e a proteção contra o desgaste dentário erosivo. O principal benefício obtido a partir dos resultados destes estudos é a identificação e a síntese de proteínas da película capazes de conferir resistência ao esmalte à dissolução causada por ácidos não bacterianos. Estas proteínas poderão ser sintetizadas e incorporadas a produtos odontológicos, visando o fortalecimento da película, aumentando assim o potencial protetor contra os ácidos. Nos estudos conduzidos nesse projeto serão aplicados métodos de simulações computacionais de Dinâmica Molecular all-atom para elucidação, microscópica, das interações entre as superfícies de hidroxiapatita e Esqualeno Epoxidase em diferentes condições de pH, detalhando as particularidades da interação. Com isso, será possível propor peptídeos que contenham os resíduos exibidos em regiões de interação elevada. Os estudos serão conduzidos utilizando o pacote GROMACS, usando os parâmetros do campo de forças INTERFACE. Serão simuladas superfícies de hidroxiapatita com diversas faces cristalográficas. Essas superfícies serão colocadas em uma caixa de simulação com condições de contorno periódicas e solvatadas em moléculas de água. A temperatura será controlada utilizando o termostato velocity rescaling. A pressão será mantida em 1 bar utilizando o barostato de Berendsen. As interações eletrostáticas serão tratadas utilizando o método PME (Particle Mesh Ewald). As vibrações de todas as ligações serão restritas com o algoritmo LINCS. O RMSd da proteína estabilizou com a superfície dos 200ns aos 500ns de simulação por volta de 0,2 nm da superfície. Confirmando os resultados com a análise de número de contato e distância mínima.