



Conectando vidas Construindo conhecimento



XI FINOVA

27/09 a 1/10
VIRTUAL

Evento	Salão UFRGS 2021: FEIRA DE INOVAÇÃO TECNOLÓGICA DA UFRGS - FINOVA
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Utilização de Aminotransferase Como Modelo Para Engenharia de Proteínas
Autor	THIAGO STEINDORFF KRUGER
Orientador	HUGO VERLI

Utilização de Aminotransferase Como Modelo Para Engenharia de Proteínas

Nesse projeto, eu iniciei a produção de uma série de simulações de dinâmica molecular da enzima aminotransferase PglE de *Campylobacter jejuni*, que realiza a segunda etapa na rota de N-glicosilação na bactéria, escolhida por ser um bom modelo para glico-engenharia de proteínas e por fazer parte do mecanismo de N-glicosilação melhor caracterizado até o momento em procariotos, visando o aprendizado das metodologias de bioinformática e de engenharia de proteínas, a caracterização do complexo enzimático e da sua dinâmica molecular e a descrição da catálise para, a partir desses resultados, atuar avaliando possíveis modificações na estrutura da enzima para interferir racionalmente na reação catalisada, seja modulando a sua ação catalítica, aumentando a sua estabilidade, aumentando a sua atividade, alterando a sua afinidade por substratos ou conferindo novas funções a ela. Os métodos empregados são a modelagem molecular, a ancoragem molecular, a simulação de dinâmica molecular clássica e o método híbrido de mecânica quântica e mecânica molecular. Os resultados parciais compreendem a aprendizagem das técnicas referidas, com a produção de dados sobre a atividade da enzima sozinha em solução, e a produção do complexo pré-catalítico contendo a enzima e o seu cofator, enquanto eu inicio os estudos para a simulação do processo catalítico em si com o método de QM/MM.