



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
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 anteriores foram aplicados métodos de simulações computacionais de Dinâmica Molecular all-atom para elucidação, microscópica, das interações entre as superfícies de hidroxiapatita e Esqualeno Epoxidase em condição de pH 5, detalhando as particularidades da interação. O estudo foi conduzido utilizando o pacote GROMACS, usando parâmetros do campo de forças INTERFACE. Após as simulações, mostrou-se que o RMSd da proteína estabilizou com a superfície dos 200ns aos 500ns por volta de 0,2 nm da superfície, confirmando os resultados com a análise de número de contato e distância mínima. Os resultados foram apresentados no Salão de Iniciação Científica da UFRGS em 2020. Em uma nova etapa, a superfície será analisada com o auxílio do software Materials Studio, BIOVIA. Com uma primeira ambientação são realizados os tutoriais oferecidos pela BIOVIA, como Visualizer Tutorials, Modules Tutorials, Installation and Administration Guide, DMol3 Guide e System Requirement, a fim de capacitar os participantes do projeto para proceder à utilização da assinatura completa do software. O acesso é remoto pelo AnyDesk, permitindo que o treinamento oferecido seja concluído para que, logo após, seja instalada a licença oficial nos computadores da UFRGS. Artigos iniciais, como Modelling the Crystal Structure of a 30 nm Sized Particle based Hydroxyapatite Powder Synthesised under the Influence of Ultrasound Irradiation from X-ray powder Diffraction Data (BRUNDAVANAN, R.K, 2013), permite reconhecer algumas sinalizações quanto à utilização do Materials Studio na modelação de estruturas cristalinas, como a própria Hidroxiapatita.