

A membrana celular é a interface entre os meios externo e interno de uma célula. A atividade do fármaco resulta do seu contato com membranas celulares e por isso o estudo das interações entre fármacos e a membrana em nível molecular é de grande importância na elaboração de medicamentos e na explicação do mecanismo de ação destes. A simulação computacional por dinâmica molecular permite a obtenção desses detalhes.

A moricina representa um polipeptídeo com 42 aminoácidos e teve atividade bactericida constatada. A sua estrutura em solução apresenta um domínio de α -hélices. Anteriormente, neste mesmo projeto, obtivemos um modelo Coarse-Graining (CG) estável para a moricina a partir da sua estrutura cristalina obtida no Protein Data Bank (PDB) sob o código 1KV4.

Suspeita-se que o modelo CG seja muito resumido. Sabe-se experimentalmente que, quando solvatada em metanol, a moricina mantém o domínio de α -hélices na sua estrutura secundária. Busca-se então um campo de força que coincida os resultados teóricos com os experimentais. Com esse objetivo foram simuladas soluções da moricina em água e metanol para diferentes campos de força, GROMOS 53a6, GROMOS 43a1 e AMBER. Dessas simulações, compararam-se os deslocamentos quadráticos das coordenadas para os carbonos α da proteína referente à estrutura cristalina. Observaram-se maiores desvios para os campos de força GROMOS. A análise da estrutura secundária da moricina mostra que os campos de força baseados na metodologia GROMOS não mantêm o domínio das α -hélices. No outro lado, o campo de força AMBER apresenta a estruturação α -helical no ambiente metanólico em acordo com o experimento. Sugere-se o uso desse campo de força em simulações futuras da moricina.