

039

ANÁLISES ESTRUTURAIS DE SUFU, UMA PROTEÍNA ARCABOUÇO DE COFADORES [FE-S] DE ENTEROCOCCUS FAECALIS. Eduardo Preusser de Mattos, Gustavo Pelicioli Riboldi, Ana Paula Guedes Frazzon, Hugo Verli, Jeverson Frazzon, Luiz Augusto Basso (orient.) (UFRGS).

Cofatores ferro-enzofre ([Fe-S]) são grupos prostéticos inorgânicos sintetizados por três maquinarias protéicas já determinadas, os sistemas NIF, ISC e SUF. Apesar de bem descritas em diversos organismos, pouco se conhece sobre essas proteínas em bactérias Gram-positivas. O presente estudo objetiva caracterizar filogenética e estruturalmente a proteína arcabouço SufU de *Enterococcus faecalis*. Buscas no genoma de *E. faecalis* com a ferramenta BLAST revelaram seqüências similares a IscU de *Escherichia coli*. Observou-se que SufU apresenta todas as características essenciais para sua atividade biológica, incluindo resíduos de aminoácidos envolvidos na formação de cofatores [Fe-S]. Análises de filogenia revelaram estreitas relações de SufU com proteínas ortólogas de outros organismos Gram-positivos. Além disso, estudos para determinações estruturais foram estabelecidos. Realizou-se a modelagem estrutural de SufU pela sobreposição de sua seqüência primária com o modelo cristalográfico PDB:1su0 (*Streptococcus pyogenes*), seguida de trajetória de dinâmica molecular de 50 nanossegundos (ns) para refinamento e verificação de alterações estruturais. O modelo resultante mostrou-se estável, contendo alterações em sua estrutura secundária perto do sítio ativo e dos resíduos conservados de cisteína, indicando alta flexibilidade em tais locais. A estrutura PDB:1su0 também foi submetida à trajetória de 50 ns para validação do modelo. Ainda, efetuou-se a modelagem molecular da seqüência primária de IscU sobre a estrutura cristalográfica de SufU, seguida de trajetória de 50 ns, de modo a identificar diferenças em tais proteínas, encontradas nos filos Proteobacteria e Firmicutes, respectivamente. Dessa maneira, observaram-se várias alterações em nível de estrutura secundária, principalmente na região C-terminal das proteínas ortólogas entre organismos Gram-positivos e Gram-negativos. (CNPq).