

Para a indústria farmacêutica, o estudo da interação entre fármacos e membranas celulares é de extrema importância. Essa pesquisa se foca na Moricina, uma proteína que foi originalmente isolada do bicho-da-seda e tem sua atividade bactericida comprovada. Ela é representada por um polipeptídeo de 42 aminoácidos, e em solução a estrutura de α -hélices predomina. Para estudar seu comportamento na presença de uma membrana celular bacteriana foi utilizada a bicamada lipídica DOPC (Dioleil-Fosfatidil-Colina). Em simulações anteriores foi constatado que as moléculas de Moricina se mantêm estáveis na forma de hexâmeros. A partir dessa informação foram formados hexâmeros artificialmente, e esses, por sua vez, foram colocados na presença da membrana DOPC. Para realizar as simulações foi utilizado o método de Dinâmica Molecular. Para isso, a membrana foi solvatada em água com íons cloreto e sódio em concentrações próximas às fisiológicas, teve sua energia minimizada com o algoritmo Steepest Descent, sua pressão e temperatura mantidas constantes com o algoritmo Parrinello-Rahman e submetida ao campo de força GROMOS, mais especificamente, o GROMOS53a6. Nas primeiras simulações realizadas não houve uma inserção natural da proteína na bicamada lipídica, o que provavelmente se dá pelas limitações do campo de força GROMOS, mas quando a Moricina é inserida artificialmente é possível notar que há um fluxo contínuo de moléculas de água dentro da membrana, levando a imaginar um possível rompimento. Durante as simulações foram monitorados vários fatores, tais como: temperatura, pressão, energias potenciais, energias cinéticas, rotações, posições, perfil de densidade, entre outros. Grande parte já alcançou uma estabilidade satisfatória, mas outros fatores indicam a necessidade de mais tempo de simulação. Futuramente a idéia é trocar o campo de força GROMOS pelo campo de força AMBER, que mesmo tendo se mostrado potencialmente melhor e mais preciso em simulações com a proteína, ainda não foi possível deixá-lo compatível com a membrana DOPC.