

TAL 797 – Seminário

Data: 24/06/2020

Aluno: Daniela Abrantes Leal ¹

Orientador: Eduardo Basílio de Oliveira ¹

¹ Departamento de Tecnologia de Alimentos, UFV-MG.

Dinâmica molecular computacional: aspectos teóricos e exemplos de aplicação ao estudo de proteínas e polissacarídeos de relevância tecnológica

Simulações de Dinâmica Molecular (DM) são uma técnica computacional de estudo de biomoléculas em escala atômica, que permite avaliar variações conformacionais em função do tempo, com o objetivo de prever ou explicar propriedades físico-químicas ou bioquímicas das biomoléculas. Apesar de seu potencial para propiciar, sem a execução de experimentos não raro muito caros, uma compreensão racional de propriedades técnico-funcionais de biomoléculas alimentares conhecidas macroscopicamente mas ainda não inteiramente compreendidas em escala molecular, sua aplicação em ciência de alimentos ainda é incipiente. As simulações de DM fundamentam-se nos princípios da mecânica clássica, e considera os átomos como partículas esféricas individuais com massa, raio e carga elétrica definidos. As ligações covalentes são consideradas como molas que interconectam essas esferas. Os cálculos computacionais baseiam-se na 2ª lei de Newton, admitindo que moléculas são conjuntos de átomos unidos por forças harmônicas elásticas (ligações covalentes e interações intermoleculares). A representação matemática das componentes da energia potencial do sistema simulado em função de características estruturais (comprimentos ângulos planos e diedros de ligações covalentes) e de interação entre átomos não ligados covalentemente (van de Waals e eletrostáticas) é comumente conhecida por “campo de forças”. No estudo de proteínas e de polissacarídeos, as etapas de uma simulação de DM consistem em: i) obtenção da estrutura tridimensional inicial da biomolécula; ii) seleção do campo de forças parametrizado para essa classe de biomoléculas; iii) preparo do sistema (solatação etc.); iv) minimização de energia/relaxamento das estruturas; v) cálculo das trajetórias; vi) análise das trajetórias (o que é intelectualmente árduo e específico para cada sistema estudado). Neste seminário, serão apresentadas, de modo resumido, as bases teóricas da DM, bem como exemplos da literatura recente de aplicação dessa abordagem ao estudo de uma proteína e de um polissacarídeo de interesse na área de alimentos.

Referências bibliográficas:

CHEN, G. et al. Molecular Dynamics Simulation for Mechanism Elucidation of Food Processing and Safety : State of the Art. **Comprehensive reviews in Food Science and Food Safety**, v. 18, p. 243–263, 2019.

SINGH, A. et al. Application of molecular dynamic simulation to study food proteins : A review. **Critical Reviews in Food Science and Nutrition**, p. 1–11, 2017.

TAO, X. et al. Recent developments in molecular docking technology applied in food science: a review. **International Journal of Food Science and Technology**, v. 55, n. 1, p. 33–45, 2020.

WENG, L; STOTT, S. L.; TONER, M. Exploring Dynamis and Structure of Biomolecules , Cryoprotectants, and Water Using Molecular Dynamics Simulations: Implications for Biostabilization and Biopreservation. **Annual Review of Biomedical Engineering**, v. 21, p. 1-31, 2019.



Daniela Abrantes Leal

Doutoranda – PPGCTA-UFV



Prof. Eduardo Basílio de Oliveira

Orientador – PPGCTA-UFV