

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2022

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jeffer Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São
Carlos: IFSC, 2022.

446 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Título

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

PG40

Cluster epa de Enterococcus faecalis : EpaE

DANTAS, Livia; NASCIMENTO, Alessandro

livia.clementino@usp.br

A resistência de patógenos a antimicrobiano é um problema de saúde pública, com tendência a se agravar ao longo do tempo. A consequência dessa resistência é refletida no número de mortes provocadas por infecções de tais microrganismos. (1) No contexto de resistência bacteriana a antibióticos, iniciou-se o estudo de enzimas presentes no cluster gênico *epa* (2), de *Enterococcus faecalis*. As proteínas Epa sintetizam e exportam alguns carboidratos constituintes da parede celular de *Enterococcus*, envolvidos também na composição de biofilmes. Das proteínas Epa, a enzima EpaE teve sua estrutura determinada. Um conjunto de dados foi coletado na linha Manacá do anel síncroton brasileiro, o Sirius. O grupo espacial do cristal é o P 21, e apresenta fração de twinning pseudomeroedral. A estrutura da EpaE foi determinada a 2.8 Å de resolução. A docagem molecular a partir da similaridade estrutural com a molécula dTTP, um dos reagentes da EpaE, foi realizada pelo LiBELa. (3) Das moléculas selecionadas, testou-se o poder de interação entre a EpaE com Doripenem, Benzthiazida e Bicalutamida por thermofluor. Esta técnica analisa a temperatura de desnovelamento proteico em diferentes condições na qual a proteína foi exposta. Compostos que gerarem um Tm parecido com o obtido na presença dos ligantes da EpaE, dTTP, glicose-1-fosfato e magnésio, provavelmente também se ligam à esta enzima, indicando potenciais inibidores da EpaE.

Palavras-chave: Resistência bacteriana a antibióticos. *Enterococcus faecalis*. Biofilme. *Cluster epa*.

Agência de fomento: FAPESP (2017/24901-8)

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **New report calls for urgent action to avert antimicrobial resistance crisis**. 2019. Disponível em: <https://www.who.int/news-room/detail/29-04-2019-new-report-calls-for-urgent-action-to-avert-antimicrobial-resistance-crisis>. Acesso em: 01.09.22.
- 2 XU, Y. *et al.* Analysis of a gene cluster of *Enterococcus faecalis* involved in polysaccharide biosynthesis. **Infection and Immunity**, v. 68, n. 2, p. 815–823, 2000. ISSN 00199567.
- 3 MUNIZ, S.; NASCIMENTO, A. S. Ligand- and receptor-based docking with LiBELa, **Journal of Computer-Aided Molecular Design**, v.29,n.2,p.713-723, June, 2015.