

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 Goettens

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jefer 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

PG52

Estudos estruturais da proteína Tiamina Monofosfato Sintase de *Enterococcus faecalis* (EfThiE)

GUTIERREZ, Raissa Ferreira; NASCIMENTO, Alessandro Silva

raissa.gutierrez@usp.br

Atualmente, a busca por novos antibióticos continua sendo uma importante estratégia para o combate a microorganismos resistentes. (1) Neste contexto, estudamos enzimas da via de biossíntese de tiamina em *Enterococcus faecalis*, uma das principais causas de infecções hospitalares no mundo. Na literatura, é possível encontrar artigos que exploram essas enzimas como potenciais alvos ao combate de bactérias multirresistentes e, também do protozoário *Plasmodium falciparum*. (2) Um dos objetivos deste projeto é determinar a estrutura cristalográfica da proteína tiamina monofosfato sintase (EfThiE) de *E. faecalis*. ThiE desempenha papel central na via de biossíntese de tiamina acoplado os precursores forforilados de HMP (4-amino-2-metilpirimidina-5-il)metanol) e 5-(2-hidroxi-etil)-4-metil tiazol (THZ) para formar tiamina monofosfato (TMP). (3) Conjuntos de dados de difração de raios-X de EfThiE foram coletados na linha Manacá/Sirius (Campinas, Brazil). O processamento das imagens foi realizado pelo programa AutoProc, que automatiza a indexação (XDS), integração (XDS), escalonamento (Aimless) e análise de anisotropia (Staraniso). O processamento detectou que o conjunto é anisotrópico ($a = 2.5 \text{ \AA}$, $b = 2.5 \text{ \AA}$ e $c = 2.0 \text{ \AA}$) e a análise dos dados pelo programa xtriage (Phenix) detectou que o conjunto possui simetria translacional não cristalográfica (tNCS). A substituição molecular foi realizada pelo programa Phaser com um modelo de EfThiE criado pelo programa AlphaFold. O programa Autobuild (Phenix) foi utilizado para construir as cadeias das proteínas. Além dos problemas acima mencionados, detectamos que os parâmetros R-work e R-free não diminuem após ciclos de refinamentos pelo programa phenix.refine para o grupo espacial P6522, no qual o conjunto foi primariamente indexado. Desconfiamos que a simetria real pode ser menor e o twinning faz com que o conjunto pareça ter uma simetria maior. Neste momento, estamos fazendo testes para definir o grupo espacial correto. A expectativa, após resolver esse caso difícil de processamento, é disponibilizar mais um exemplar da enzima ThiE, pois não há muitas estruturas experimentais resolvidas desta proteína no Protein Data Bank. Resultados preliminares animadores foram obtidos no grupo espacial P3221 e regra de twinning "-h,-k,l". O refinamento está em progresso com valores de Rwork/Rfree em torno de 0.20/0.25 no momento.

Palavras-chave: Resistência antimicrobiana. *Enterococcus faecalis*. ThiE.

Agência de fomento: CAPES (FAPESP: 2015/26722-8)

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Global action plan on antimicrobial resistance**. Geneva: WHO, 2015.

2 MÜLLER, I. B.; HYDE, J. E.; WRENGER. C. Vitamin B metabolism in *Plasmodium falciparum* as a source of drug targets. **Trends in Parasitology**, v. 26, n.1, p. 35–43, 2010.

3 DU, Q.; WANG, H.; XIE, J. Thiamin(Vitamin B1) biosynthesis and regulation: a rich source of anti-microbial drug targets? **International Journal of Biological Sciences**, v. 7, n. 1, p. 41-52, 2011.