

**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

Jefter 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 Mastrandiono

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. Titulo

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

PG42

Estudos biofísicos e estruturais das septinas de *Drosophila melanogaster*

FERNANDES, Adriano; CABREJOS, Diego Antonio Leonardo; CAVINI, Italo Augusto; ROSA, Higor; PEREIRA, Humberto D.; NASCIMENTO, Alessandro; GARRATT, Richard

adriano.fernandes@usp.br

As septinas são proteínas conhecidas originalmente por atuarem na formação do septo durante brotamento em *Saccharomyces cerevisiae*. (1) Foram descritos em fungos e animais, e ausentes em plantas e bactéria. Apresentam como principais características um domínio conservado de ligação aos nucleotídeos de guanina (GTP/GDP) e a formação de filamentos oligoméricos, que são estruturas altamente organizadas. (1) Para os estudos de septinas deste trabalho foi escolhido como organismo modelo *Drosophila melanogaster*, ou mosca-da-fruta, um organismo modelo representante da classe dos insetos. Esta espécie possui cinco genes codificantes às septinas Sep1, Sep2, Sep4, Sep5 e Pnut e filamentos se formam a partir da polimerização de hexâmeros lineares, sendo que o mais bem caracterizado tem a seguinte organização Sep1-Sep2-pnut-pnut-Sep2-Sep1. (2) Apesar do conhecimento dos genes relativos às septinas de *Drosophila melanogaster*, ainda há carência de informações estruturais de alta resolução que permitiriam compreender a montagem do hexâmero da forma correta. (3) Neste estudo foram investigados parâmetros biofísicos e estruturais destas septinas em solução, bem como avaliada a formação de complexos. Foi determinado a estrutura do heterodímero Sep1(G).Sep2(G) por difração de raios-X com resolução de 2,38 Å, sendo este o primeiro resultado experimental com informações estruturais para septinas desta espécie. Além disto, foram realizadas modelagens computacionais por homologia, dinâmica molecular e experimentos de *Adaptive Steered Molecular Dynamics* (ASMD) a fim de investigar os aminoácidos fundamentais para estabilizar as interações entre subunidades essenciais para a polimerização e por consequência, suas funções celulares. Mutagênese sítio-dirigida foi usado para testar hipóteses que surgiram a partir da modelagem e servir para demonstrar uma diferença estrutural importante na interface central do hexâmero quando comparado com o complexo humano equivalente.

Palavras-chave: Septinas. Cristalografia de raios-X. Simulação.

Agência de fomento: CNPq (140739/2017-3)

Referências:

- 1 HARTWELL, L. H.; CULOTTI, J.; REID, B. Genetic control of the cell-division cycle in yeast. I.Detection of mutants. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 66, n. 2, p. 352-359, June 1970.
- 2 NEUFELD, T. P.; RUBIN, G. M. The *Drosophila* peanut gene is required for cytokinesis and encodes a protein similar to yeast putative bud neck filament proteins. **Cell**, v. 77, n. 3, p. 371-379, May 1994.
- 3 ADAM, J. C.; PRINGLE, J. R.; PEIFER, M. Evidence for functional differentiation among *Drosophila* septins in cytokinesis and cellularization. **Molecular Biology Cell**, v. 11, n. 9, p. 3123-3135,

Sept.2000.