

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2021**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

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

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

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

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

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

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Beatriz Souza Castro

Carolina Salgado do Nascimento

Edgard Macena Cabral

Fernando Camargo Soares

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Inara Yasmin Donda Acosta

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Kelly Naomi Matsui

Leonardo da Cruz Rea

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Natália Carvalho Santos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Vinícius Pereira Pinto

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

(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.]. São Carlos: IFSC, 2021.

412 p.

Texto em português.

1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Título

ISBN 978-65-993449-3-0

CDD 530

PG134

Um ensaio de modelagem por homologia para a estrutura RmlA de *Streptococcus pneumoniae* SP19-BS75

OLIVEIRA, L. F. M.¹; NASCIMENTO, A. S.¹

louis.oliveira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A RmlA é a primeira enzima na via metabólica para a síntese de L-ramnose. Este monossacarídeo é um bloco de construção necessário para a síntese dos polímeros que contêm ramnose (RhaCW), que estão presentes na parede celular de certos tipos de bactérias e desempenham um papel na resistência aos antibióticos.(1) Assim, essa enzima é um alvo interessante para o desenvolvimento de novos fármacos contra esses patógenos.(2) Obtivemos a estrutura prevista do RmlA para a cepa SP19-BS75 de *Streptococcus pneumoniae* (3) pela técnica de Modelagem por Homologia usando servidores como I-TASSER e Robetta. Em cada caso, pelo menos cinco estruturas diferentes foram geradas e a melhor estrutura foi validada por um alinhamento estrutural exaustivo contra o Protein Data Bank usando o Dali Server. Sua estrutura foi usada para construir as espécies tetraméricas biologicamente ativas e posteriormente otimizadas por simulação dinâmica molecular. Esses resultados oferecem uma estrutura otimizada prevista, mais próxima da enzima encontrada na natureza e serão úteis no futuro para resolver o problema das fases durante a substituição molecular após ensaios experimentais de difração de raios-x em cristalografia de proteínas. Além disso, o modelo obtido atinge a confiabilidade necessária para seu uso em uma triagem baseada em estrutura de candidatos a inibidor.

Palavras-chave: Modelagem por homologia, RmlA, Dinâmica molecular.

Referências:

- 1 MISTOU, M. Y.; SUTCLIFFE, I. C.; VAN SORGE, N. M. Bacterial glycobiology: Rhamnose-containing cell wall polysaccharides in gram-positive bacteria. *FEMS Microbiology Reviews*, v. 40, n. 4, p. 464–479, 2016.
- 2 BAUMGARTNER, J. *et al.* Structure of the *Bacillus anthracis* dTDP-*L*-rhamnosebiosynthetic enzyme glucose-1-phosphate thymidylyltransferase (RfbA). *Acta Crystallographica F*, v. 73, n. 11, p. 621–628, 2017.
- 3 MEDEIROS, M. I. C. *et al.* Antimicrobial susceptibility of *streptococcus pneumoniae* isolated from patients in the northeastern macroregion of São Paulo state, Brazil, 1998-2013. *Jornal Brasileiro de Patologia e Medicina Laboratorial*, v. 53, n. 3, p. 177–182, 2017.