

Explorando a interação do peptídeo derivado da estateterina com a hidroxiapatita: um estudo em dinâmica molecular

Hannah Zomignan Barros¹ (0009-0000-0406-0172), Carolina Ruis Ferrari¹ (0000-0002-3997-043X), Tiago Espinosa de Oliveira² (0000-0001-9798-9916), Marília Afonso Rabelo Buzalaf¹ (0000-0002-5985-3951), Paulo Augusto Netz³ (0000-0003-4242-0591)

¹ Departamento de Ciências Biológicas, Faculdade de Odontologia de Bauru, Universidade de São Paulo, Bauru, São Paulo, Brasil

² Departamento de Farmacociências, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil

³ Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil

O peptídeo derivado da estateterina (StatpSpS) vem sendo promissor na proteção contra a erosão dentária e elucidar a sua interação com a superfície da hidroxiapatita (HAP) é de extrema importância. O objetivo do presente estudo foi investigar o mecanismo relacionado à adsorção desse peptídeo com a HAP por meio de simulações de dinâmica molecular. O StatpSpS foi posicionado de modo paralelo à superfície da HAP em 2 orientações: 1- resíduos neutros e negativos voltados para a superfície; 2- resíduos positivos voltados para a superfície. Foi gerado também um sistema contendo o peptídeo sem HAP. Os sistemas foram submetidos a simulações de dinâmica molecular -all atom, em triplicata de 500 ns, utilizando o pacote GROMACS, o qual também foi usado nas análises dos resultados. Em todos os sistemas, houve apenas mudanças conformacionais moderadas no StatpSpS que, após uma leve migração, mostrou-se próximo à superfície. O peptídeo adsorvido à HAP apresentou, em média, um menor desvio quadrático médio e maior raio de giro quando comparado sem a presença da superfície. Quanto à distância dos resíduos, notou-se que muitos apresentaram distâncias curtas e estáveis, apontando para uma forte interação. Na orientação 2, observou-se um papel importante dos resíduos de arginina carregados positivamente. A análise qualitativa da trajetória permitiu ver uma ligeira tendência para aumentar os contatos de resíduos positivos, com o final da simulação iniciada na orientação 1 assemelhando-se à orientação 2. Em conclusão, os resíduos carregados positivamente têm maior propensão à ancoragem na superfície da HAP, destacando a importância do StatpSpS na proteção contra a erosão dentária, já que as simulações indicam migração próxima à HAP e forte interação quando adsorvido. Esses resultados são fundamentais para o entendimento do mecanismo de adsorção do StatpSpS à HAP, ressaltando a importância dos seus mecanismos para o desenvolvimento de estratégias eficazes na prevenção da erosão dentária.

Fomento: FAPESP (2021/14161-2)