



III CONGRESSO BRASILEIRO
DE CIÊNCIAS BIOLÓGICAS
ON-LINE

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA ESTRUTURA BIOQUÍMICA DA AQUAPORINA-1

GUILHERME VIEIRA AMORIM; BRUNA TOBIAS DOS SANTOS; DALYLA MARGARIDA PEREIRA; VITOR HUGO DE SOUZA GREGOLIN; RENATO MASSAHARU HASSUNUMA

Introdução: As aquaporinas são proteínas canais que realizam o transporte de água através da membrana plasmática em eritrócitos, células endoteliais, células do revestimento gastrointestinal, de glândulas sudoríparas e pulmões. Estruturalmente, são homotetrâmeras, ou seja, são formadas por quatro subunidades proteicas idênticas. Assim, a água é transportada por cada um destes quatro canais de cada subunidade, sendo que na entrada de cada canal existem aminoácidos que impedem a entrada de solutos e íons como o hidrônio ou hidroxila pelos canais. **Objetivo:** O objetivo principal da atual pesquisa foi desenvolver *scripts* para o *software* RasMol para criação de imagens que ilustram a estrutura bioquímica da aquaporina-1. **Metodologia:** A partir do levantamento de arquivos PDB sobre aquaporina-1, obtidos no *site Protein Data Bank*, foram *scripts* para o *software* RasMol no intuito de observar a estrutura secundária da proteína. **Resultados:** A partir do arquivo 1FQY.pdb foi desenvolvido um *script* para o *software* RasMol, em que é possível observar a estrutura bioquímica de uma das subunidades da aquaporina-1. Cada subunidade é formada por oito alfa-hélices, representadas por espirais que na figura desenvolvida estão representadas nas cores amarelo matiz, laranja, vermelho, azul matiz, verde matiz, ciano, púrpura e rosa. Estas oito alfa-hélices formam uma estrutura que possui o formato de um canal, por onde as moléculas de água são transportadas. **Conclusão:** Na análise da estrutura bioquímica da aquaporina-1 foi possível observar que cada subunidade dela é formada por uma proteína do tipo toda alfa, apresentando um total de oito alfa-hélices, as quais formam um canal por onde as moléculas de água são transportadas.

Palavras-chave: Aquaporina 1, Biologia computacional, Proteínas de membrana.