

ENGENHARIA DE PROTEÍNAS CONTRA A POLUIÇÃO POR PET: ANÁLISE MOLECULAR DE VARIANTES DA PETASE

BRUNA LETÍCIA PORTILHO FURTADO; CLAUBER HENRIQUE SOUZA DA COSTA;
CARLOS GABRIEL DA SILVA DE SOUZA; JERÔNIMO LAMEIRA

Introdução: A pesquisa aborda as preocupações ambientais e de saúde relacionadas ao polietileno tereftalato (PET), destacando a descoberta da capacidade da enzima PETase, encontrada na bactéria *Ideonella sakaiensis*, em degradar o PET. No entanto, a eficácia da PETase é limitada pela sua estabilidade térmica. O estudo propõe investigar três variantes da PETase através de simulações de dinâmica molecular para entender suas alterações estruturais e funcionais, visando melhorar sua eficácia na degradação do PET e contribuir para soluções ambientais. **Objetivo:** O objetivo primordial deste estudo é realizar uma investigação detalhada das três variantes da PETase (R280A, S121D/D186H e S121E/D186H/R280A), escolhidas por sua atividade enzimática ligeiramente aprimorada em relação à enzima selvagem. Para isso, serão empregadas simulações avançadas de dinâmica molecular, visando compreender as modificações estruturais e funcionais dessas variantes. **Materiais e Métodos:** Os métodos empregados neste estudo envolveram o uso de estruturas da PETase, enquanto o ligante PET foi construído a partir da estrutura tridimensional e as simulações de dinâmica molecular foram conduzidas utilizando técnicas padrão. As simulações foram executadas para a PETase selvagem e suas variantes, com uma duração total de 500ns, permitindo uma análise detalhada das alterações estruturais e modificações induzidas pela ligação do substrato PET. **Resultados e Discussão:** Os resultados das simulações de dinâmica molecular revelaram que as variantes da PETase (R280A, S121D/D186H e S121E/D186H/R280A) apresentaram desvios estruturais mais pronunciados em comparação com a enzima selvagem, conforme evidenciado pela análise do Root Mean Square Deviation (RMSD). Especificamente, as mutações induziram maiores flutuações conformacionais nas estruturas das variantes, indicando alterações significativas em suas conformações em comparação com a PETase selvagem. Além disso, a análise do Root Mean Square Fluctuation (RMSF) revelou padrões de flutuação distintos entre as variantes e a enzima selvagem. Regiões específicas das variantes, como os locais das mutações, demonstraram maior flutuação em comparação com a PETase selvagem, sugerindo alterações na dinâmica estrutural induzidas pelas mutações. **Conclusão:** Essas análises fornecem insights valiosos sobre as mudanças conformacionais e dinâmicas das variantes da PETase em comparação com a enzima selvagem, destacando a influência das mutações na estrutura e estabilidade da enzima auxiliando na mitigação dos problemas ambientais associados a esse polímero.

Palavras-chave: Pet, Petase, Simulação computacional, Dinâmica molecular, Biodegradação.