

## Predição estrutural da proteína isoprene synthase, chloroplástico de *Pueraria montana* var. *lobata* (Kudzu vine) (*Pueraria lobata*).

Adam H. R. Sousa<sup>1</sup>, Fábio B. S. de Souza<sup>2</sup>, Bruna A. S. de Souza<sup>3</sup>, Nelson A. N. de Alencar<sup>3</sup>, Claudio A. Nahum<sup>3</sup>, Marlice C. Martelli<sup>4</sup>, Davi do S. B. Brasil<sup>4</sup>

1. Estudante da Fac.de Engenharia Química, Laboratório de Desenvolvimento de Ideias, UFPA; \*helligioso@gmail.com

2. Estudante da Fac.de Engenharia Química, Laboratório de Modelagem Molecular, UFPA;

3. Estudantes e Pesquisador, Laboratório de Planejamento e Desenvolvimento de Fármacos, UFPA;

4. Pesquisadores, Fac.de Engenharia Química/ Instituto de Tecnologia, UFPA.

Palavras Chave: *Isoprene synthase*, *isopreno*, *biossíntese*

### Introdução

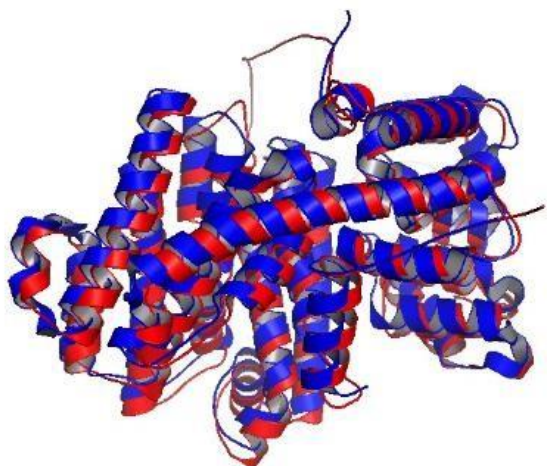
Cerca de um terço dos angiospermas emitem uma fração significativa de carbono que será fixado como isopreno. A emissão de isopreno é um importante processo biológico, pois desempenha um papel relevante na química atmosférica (Thompson, 1992). A função do isopreno tem sido associada a termotolerância, ou seja, à proteção contra danos causados pela rápida flutuação de temperatura (Sharkey *et al.*, 2001). Esta hipótese foi confirmada recentemente por Peñuelas *et al.* (2005). Além disso, tem sido mostrado que esta substância pode proteger contra espécies reativas de oxigênio e o ozônio (Affek & Yakir, 2002). A proteína isoprene synthase é responsável pelo mecanismo catalítico enzimático de conversão do difosfato de dimetilalilo (DMAPP) em isopreno. O DMAPP usado para a síntese de isopreno está presente em todos os cloroplastos de plantas (Lichtenthaler, 1999).

Levando em consideração o que foi descrito acima, o objetivo deste trabalho foi realizar a predição estrutural por homologia molecular desta proteína, visando a compreensão de seu mecanismo catalítico enzimático na biossíntese de isopreno.

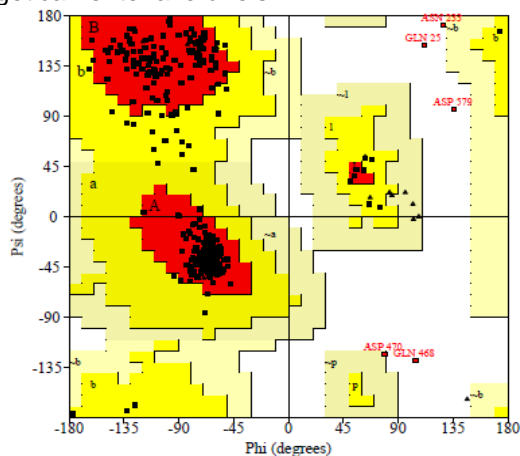
### Resultados e Discussão

A predição estrutural da proteína isoprene synthase de *Pueraria lobata* por homologia molecular foi realizada utilizando o software Modeller, através do qual pôde-se propor a estrutura da proteína-alvo partindo de sua sequência primária obtida no servidor UNIPROT e da estrutura primária homóloga tridimensional depositada no banco de dados Protein Data Bank (PDB) de código 3n0f.

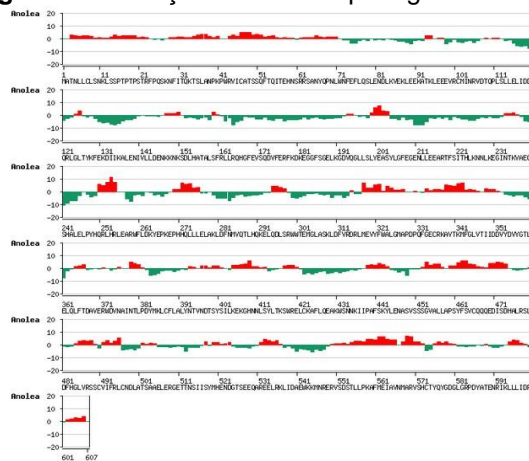
**Figura1.** Sequência de aminoácidos obtida para a proteína isoprene synthase de *Pueraria lobata*. Em azul o molde de código 3n0f e em vermelho o modelo construído.



**Figura 2.** Validação do modelo pelo gráfico de Ramachandran com 93% dos resíduos em regiões energeticamente favoráveis.



**Figura 3.** Validação do modelo pelo gráfico de Anolea.



O valor do D-fire foi igual a -841,35.

### Conclusões

O presente modelo encontra-se em processo final de validação. Através da elaboração do modelo tridimensional da proteína isoprene synthase será possível realizar o estudo das interações moleculares desta proteína com a DMAPP e o isopreno.

### Agradecimentos

CAPES/CNPQ

Thompson AM (1992) The oxidizing capacity of the Earth's atmosphere: probable past and future changes. *Science* 256: 1157–1165.

Sharkey TD, Chen XY, Yeh S (2001) Isoprene increases thermotolerance of fosmidomycin- fed leaves. *Plant Physiol* 125: 2001–2006.

Peñuelas J, Llusia J, Asensio D, Munne-Bosch S (2005) Linking isoprene with plant thermotolerance, antioxidants, and monoterpene emissions. *Plant Cell Environ* (in press).

Lichtenthaler HK (1999) The 1-deoxy-D-xylulose-5-phosphate pathway of isoprenoid biosynthesis in plants. *Annu Rev Plant Physiol Plant Mol Biol* 50: 47–65.

Affek HP, Yakir D (2002) Protection by isoprene against singlet oxygen in leaves. *Plant Physiol* 129: 269–277