



SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS DE PEPTÍDEOS ANTIMICROBIANOS CATIÔNICOS EM MEMBRANAS BIOLÓGICAS: UMA VISÃO MICROSCÓPICA DO PROCESSO

Thereza A. Soares^{1*}

¹Dept. de Química Fundamental, UFPE

*thereza.soares@ufpe.br

RESUMO

O método de dinâmica molecular oferece uma aproximação particularmente conveniente para o estudo da dinâmica estrutural de membranas por abranger simultaneamente escalas temporal e espacial, com uma precisão dificilmente acessível à técnicas experimentais de resolução atômica. Desta forma, simulações de dinâmica molecular possuem o potencial de complementar medidas experimentais ao nível molecular e em escala de tempo de nano a microsegundos. Serão apresentados resultados recentes de trabalhos no Grupo de Modelagem de BioMateriais (BioMat@UFPE) ilustrando o uso do método de dinâmica molecular para investigar mecanismos de ação de peptídeos antimicrobianos em membranas biológicas.