

Proposta de Tese de Mestrado

Tema:

Modelação molecular/Bioinformática estrutural de Hidrogenases

Local de trabalho:

Laboratório de Modelação de Proteínas, Instituto de Tecnologia Química e Biológica
Universidade Nova de Lisboa, Oeiras

Orientação:

Orientador: Prof. Cláudio M. Soares, ITQB-UNL

Plano de trabalhos sucinto:

As hidrogenases são enzimas que catalisam a reacção de conversão de hidrogénio molecular em protões e electrões, sendo muito importantes no metabolismo de alguns organismos, especialmente bactérias. Para além da importância fundamental da compreensão destes sistemas, as hidrogenases podem constituir um elemento chave em processos biotecnológicos de produção de hidrogénio molecular e/ou produção de energia de uma forma limpa e sustentável. As hidrogenases mais comuns são as chamadas [NiFe]-hidrogenases, devido a terem um centro activo com níquel e ferro internalizado na estrutura proteica. Muito embora sejam proteínas muito estudadas e razoavelmente caracterizadas estruturalmente, a compreensão dos mecanismos moleculares responsáveis pela sua actividade é ainda muito incompleta. As [NiFeSe]-hidrogenases são uma subclasse das [NiFe]-hidrogenases, e são caracterizadas por terem uma selenocisteína no centro activo. Para além de terem uma alta actividade de produção de hidrogénio, estas hidrogenases são particularmente resistentes à inactivação por oxigénio. Continuando trabalho anterior em [NiFe]-hidrogenases, pretendemos estudar os mecanismos moleculares na [NiFeSe]-hidrogenase presente em *Desulfovibrio vulgaris* utilizando técnicas de Simulação Molecular / Bioinformática Estrutural. Este trabalho vai ser feito em colaboração com um grupo de Cristalografia de Proteínas e um grupo de Bioquímica Microbiana.

Publicações anteriores relevantes para este trabalho:

- Valente, FM, Oliveira, ASF, Gnadl, N, Xavier, AV, Teixeira, M, Soares, CM, Pereira, IAC (2005) "Characterization of [NiFeSe] hydrogenase from the sulfate-reducer *Desulfovibrio vulgaris* Hildenborough", *JBIC*, **10**, 667-682.
- Teixeira, VH, Baptista, AM, Soares, CM (2006) "Pathways of H₂ towards the active site of [NiFe]-hydrogenase", *Biophys.J.*, **91**, 2035-45.
- Teixeira, VH, Soares, CM, Baptista, AM (2008) "Proton Pathways in a [NiFe]-Hydrogenase: A Theoretical Study", *Proteins*, **70**, 1010-1022

Pretende-se um estagiário/a muito motivado para trabalhar numa área de investigação em grande expansão e num grupo dinâmico e competitivo. Motivação para trabalhar com metodologias de modelação molecular e com meios informáticos é importante para o sucesso do trabalho. No entanto, não é necessária experiência prévia nestas metodologias.

O Laboratório de Modelação de Proteínas do ITQB:

O Laboratório de Modelação de Proteínas desenvolve investigação na área da simulação física de proteínas, tentando compreender processos biológicos utilizando meios computacionais, ou em colaboração com grupos de investigação experimental. O objectivo final destas investigações é a compreensão da Vida ao nível molecular e atómico, pela simulação dos seus mais pequenos componentes. O trabalho do Laboratório de Modelação de Proteínas centra-se no estudo de proteínas envolvidas em cadeias transportadoras de electrões, e em processos com interesse biotecnológico e biomédico.

São possíveis trabalhos noutras temáticas de interesse para o grupo de Modelação de Proteínas.

Para mais informações sobre o nosso trabalho visite a nossa *home page*:

<http://www.itqb.unl.pt/pm>

Ou contacte:

Prof. Cláudio M. Soares

Instituto de Tecnologia Química e Biológica

Universidade Nova de Lisboa

Av. da República – EAN,

2780-157 Oeiras

Tel: 214469610

e-mail: claudio@itqb.unl.pt