



USO DAS FERRAMENTAS DE BIOINFORMÁTICA PARA ANÁLISE COMPARATIVA DA PROTEÍNA SPIKE DE DIFERENTES ESPÉCIES DE CORONA VÍRUS

ANA KATARINA CAMPOS NUNES; ADONIS DE MELO LIMA

INTRODUÇÃO: Entende-se que os coronavírus (CoVs) são, tradicionalmente, considerados patógenos não letais para seres humanos, causando, aproximadamente, 15% dos resfriados comuns. Em 2019, foi encontrado um CoV humano mais infectivo do que o SARS-CoV e MERS-CoV, um novo coronavírus zoonótico, que cruzou espécies para infectar humanos, o SARS-CoV-2 . **OBJETIVOS:** O trabalho teve como objetivo realizar análises computacionais e comparativas nas proteínas spike das sete espécies que causam doenças em seres humanos. **METODOLOGIA:** A obtenção das sequências nos formatos FASTA e PDB das proteínas S foram obtidas no Protein Data Bank. Para análise das sequências de aminoácidos obtidas foi utilizado o Clustal W. Por último, a análise das estruturas 3D foram realizadas no software PyMol. **RESULTADOS:** Foram observadas semelhanças conservacionais de algumas sequências de aminoácidos entre as cepas estudadas, como tríades de aminoácidos de ancoragem para interação com o RBD : G-T-Y (glicínia, treonina e tirosina). Outro fator observado nas sequências permite a suposição de que os resíduos de Histamina (H) podem facilitar a ação de clivagem da TMPRSS2T. O ácido glutâmico é precursor do aminoácido Glutamina, e a presença deste nas sequências facilita a reprodução do vírus nos astrócitos, visto que o patógeno utiliza a glutamina para produzir energia e se multiplicar nessas células. **CONCLUSÃO:** A semelhança entre as cepas dos sete coronavírus que infectam seres humanos se mantém em alguns aspectos como a conservação de aminoácidos essenciais para atividades no mecanismo de infecção dentro da célula e de pontos estratégicos para a ancoragem do patógeno. As alterações verificadas , como as interações intermoleculares de maior e menor força corroboram , juntamente com a literatura científica, para a comparação do nível de infectividade das cepas analisadas. Com relação ao modelo tridimensional modelado, verificou-se a conservação da forma estrutural da proteína S entre três cepas (HCoV-229E, HCoV-OC43, HCoV-HKU1) determinando certas semelhanças na preservação de um aminoácido essencial para a ancoragem: a glicínia.

Palavras-chave: Sars-cov-2, Sequenciamento, Aminoácidos, Vírus, Comparação.