



APLICAÇÃO DE ABORDAGENS PROTEÔMICAS *IN SILICO* NO DESENVOLVIMENTO DE MÉTODOS MULTIANALÍTICOS PARA A QUANTIFICAÇÃO DE BIOMARCADORES DE FUNÇÃO E LESÃO CARDIOVASCULAR

SAMIRA PAGLIASSE DE SANTANA; NATÁLIA DOS SANTOS LEMOS; ANA PAULA BAPTISTA VIEIRA; ANA VITÓRIA DA COSTA ROSA; GIOVANI CARLO VERÍSSIMO DA COSTA

Introdução: Fatores como hipertensão arterial, dislipidemias, diabetes, tabagismo e sedentarismo contribuem para o desenvolvimento de Doenças Cardiovasculares (DCVs). Dentre estas, o Infarto Agudo do Miocárdio tem sido um desafio significativo para a saúde global. Biomarcadores cardíacos são utilizados para seu diagnóstico precoce e abordagens proteômicas têm sido aplicadas para avaliar lesões órgão-teciduals. O uso de ferramentas *in silico* pode aperfeiçoar processos de preparação da amostra e etapas instrumentais. **Objetivo:** Utilizar ferramentas de digestão de proteínas e obtenção de espectros de massas *in silico* para otimizar protocolos *in vitro*, a fim de aplicá-los em métodos de identificação e quantificação de biomarcadores proteicos de doenças cardiovasculares. **Metodologia:** Iniciamos as análises *in silico* buscando em bancos de dados as sequências proteicas biomarcadores, com o UNIPROTKB (<https://www.uniprot.org/>). Somente as sequências revisadas foram consideradas nesse estudo. Em seguida, as sequências de cada proteína foram submetidas à digestão *in silico* utilizando como modelo de enzima a Lys-C, através do software PEPTIDE CUTTER (https://web.expasy.org/peptide_cutter), a fim de gerar peptídeos digeridos de mais de 15 resíduos de aminoácidos com massa molecular capazes de produzir alinhamento em softwares de varredura. Para isso, utilizamos a ferramenta BLAST (<https://www.uniprot.org/blast>) identificando a ocorrência de peptídeos únicos e selecionando-os conforme a sua capacidade de geração de picos no espectro de massas, através do software mMass 5.5.0 - Open Source Mass Spectrometry Tool (<https://www.mmass.org/>). Desta forma, podemos prever qual estratégia pode ser mais adequada para a análise de proteínas em um protocolo de preparação de amostras *in vitro*. **Resultados:** Até agora, 22 biomarcadores de DCVs foram analisados e 2308 peptídeos foram digeridos pela Lys-C, tornando-a uma boa candidata a ser utilizada no protocolo de preparação de amostra em experimentos *in vitro*. A digestão *in silico* do marcador MOTS-c não produziu peptídeos que se enquadram nos critérios de seleção. **Conclusão:** Abordagens *in silico* podem otimizar processos de preparação da amostra e análises instrumentais, reduzir custos do processo técnico-operacional da análise das moléculas alvo e aprimorar o entendimento do comportamento dos perfis moleculares relacionados às doenças cardiovasculares.

Palavras-chave: **ABORDAGEM *IN SILICO*; ESPECTROMETRIA DE MASSAS; PROTEÍNAS; FUNÇÃO E LESÃO CARDIOVASCULAR; BIOMARCADORES**