DOI: 10.51189/iii-conbracib/6533

III CONGRESSO BRASILEIRO DE CIÊNCIAS BIOLÓGICAS ON-LINE

USANDO A BIOINFORMÁTICA PARA COMPREENDER A INIBIÇÃO DA PROTEÍNA SNAP-25 PELA TOXINA BOTULÍNICA DO SOROTIPO A

FELIPE PIRES DE CAMPOS AVERSA; RENATO MASSAHARU HASSUNUMA; PATRÍCIA CARVALHO GARCIA

Introdução: A neurotoxina botulínica do sorotipo A (BoNT/A) é a mais utilizada atualmente em produtos para uso estético e terapêutico. A ação da BoNT/A decorre da sua ligação de seu domínio de ligação com o receptor (DLR) com proteínas como a proteína associada ao sinaptossoma de 25 kDa (SNAP-25). Desta forma, a paralisia promovida pela BoNT/A ocorre a partir da ligação com a SNAP-25, a qual é essencial para a fusão de vesículas sinápticas. **Objetivo:** Desenvolver scripts para o software RasMol para produção de imagens que demonstrem a ligação entre a SNAP-25 e o DLR da BoNT/A. **Metodologia:** O levantamento de arquivos PDB que apresentam a SNAP-25 e o DLR da BoNT/A foi realizado no *site Protein Data Bank*. A partir do arquivo selecionado foram desenvolvidos *scripts* para o programa computacional RasMol. **Resultados:** A partir dos scripts desenvolvidos para o arquivo 1XTG.pdb, foi observado que a extremidade amino-terminal da proteína SNAP-25 interage com o exosítio alfa do DLR. O exosítio alfa é formado por quatro alfa-hélices, formadas pelos resíduos 102-113 (alfa-hélice 1), 310-321 (alfa-hélice 2), 335-348 (alfa-hélice 3) e 351-358 (alfa-hélice 4). A extremidade carboxi-terminal da proteína SNAP-25 apresenta uma fita beta formada pelas 201-203. Esta extremidade se liga ao exosítio beta do DLR, formada por duas fitas betas constituída pelos resíduos 255-259 e 242-246. Assim, a extremidade carboxi-terminal e o exosítio beta formam uma folha beta compostas por três fitas beta. **Conclusão:** Os scripts produzidos demonstraram que a ligação entre a SNAP-25 e o DLR da BoNT/A decorrem principalmente a partir das extremidades da proteína SNAP-25 com os exosítios alfa e beta do DLR.

Palavras-chave: Biologia computacional, Clostridium botulinum, Toxinas botulínicas do tipo a.

ISSN: 2675-813X