



## COMPARAÇÃO ESTRUTURAL DAS CADEIAS BETA DAS HEMOGLOBINAS NORMAL E FALCIFORME HUMANAS POR MÉTODO DE ALINHAMENTO DE SEQUÊNCIA

RENATO MASSAHARU HASSUNUMA; FÁBIO APARECIDO DA SILVA; PATRÍCIA CARVALHO GARCIA; MICHELE JANEGITZ ACORCI-VALÉRIO; SANDRA HELOISA NUNES MESSIAS

**Introdução:** A hemoglobina S ou falciforme (HbS) é caracterizada por uma mutação puntiforme, em que ocorre a substituição da timina pela adenina na sequência de DNA que codifica o sexto aminoácido da cadeia  $\beta$  da hemoglobina normal (Hb). Esta mutação resulta na substituição do ácido glutâmico pela valina, criando uma região hidrofóbica responsável pela polimerização da HbS. O acúmulo dos polímeros de HbS resulta na mudança na conformação das hemácias, que assumem um formato de foice, caracterizando a anemia falciforme. **Objetivo:** O objetivo principal do presente estudo foi comparar a estrutura tridimensional das cadeias beta da Hb e da HbS, por meio de alinhamento de sequência de aminoácidos. **Metodologia:** Foi realizado um levantamento de arquivos PDB no *site Protein Data Bank*, o quais foram analisados no programa computacional *TM-Align*, no intuito de comparar a estrutura tridimensional das cadeias beta da Hb e da HbS e verificar as alterações estruturais provocadas pela mutação. **Resultados:** A partir dos arquivos 2HHB.pdb (referente à Hb humana) e 2HBS.pdb (referente à HbS humana), foi realizado o alinhamento de sequência pelo *software TM-Align*, onde foi confirmada a mutação no sexto resíduo da cadeia beta da HbS e uma identidade de sequência de 99%, com 146 resíduos equivalentes. A comparação estrutural das proteínas mostrou que não existem alterações na estrutura secundária da HbS, a qual permanece com o mesmo número de alfa-hélices e fitas beta que a Hb, havendo mudanças apenas em sua estrutura terciária. **Conclusão:** Os resultados obtidos no presente estudo mostraram que a mutação no sexto aminoácido promove mudanças em na conformação tridimensional da HbS humana, mas que não comprometem a formação das alfa-hélices ou fitas beta de sua estrutura secundária.

**Palavras-chave:** Alinhamento de sequência, Anemia falciforme, Biologia computacional, Hemoglobina, Hemoglobina falciforme.