

ANÁLISE BIOINFORMÁTICA DA VARIAÇÃO ESTRUTURAL DE PROTEÍNAS EM CHLOROVÍRUS

JOÃO VICTOR R. P. CARVALHO¹, ANA KAROLINE DA NÓBREGA NUNES-ALVES¹, GARRY DUNCAN², DAVID D. DUNIGAN^{3,4}, JAMES L VAN ETEN^{3,4}, RODRIGO ARAÚJO LIMA RODRIGUES¹

1. Laboratório de Vírus, Departamento de Microbiologia, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG 31270-901, Brasil.

2. Nebraska Wesleyan University

3. Nebraska Center for Virology, University of Nebraska, Lincoln, NE 68583, USA.

4. Department of Plant Pathology, University of Nebraska, Lincoln, NE 68583, USA.

Autor correspondente: jvrodrigues934@gmail.com

Com simetria pseudo-icosaédrica e composto por 30 proteínas distintas, o capsídeo dos chlorovírus exibe uma complexidade única na virosfera. Além da espícula no vértice único da estrutura e das proteínas secundárias internas que conferem estabilidade à camada externa, a própria proteína principal do capsídeo (MCP Vp54) revela crescente diversidade entre espécies recentemente descritas. Para avaliar tal variabilidade, selecionamos duas espécies de cada subgênero de chlorovírus e utilizamos todos os isolados disponíveis em bancos de dados para comparar suas proteínas Vp54 nos níveis de sequência e estrutura. Tomando o PBCV-1 como referência, identificamos genes estruturais homólogos e avaliamos suas semelhanças por meio de um *script* interno baseado em alinhamento global em pares, possibilitando análise estatística dos resultados. Modelamos todos os homólogos com o AlphaFold2 e realizamos análises de sobreposição estrutural e acoplamento por meio do iTASSER. Os resultados indicam que a diversidade da Vp54 em chlorovírus é maior do que o relatado anteriormente, com pelo menos duas classes adicionais de ortólogos restritas a clados específicos de alphachlorovírus. Apesar disso, a estrutura geral da proteína manteve-se conservada, sem alterações conformacionais significativas, embora tenhamos identificado múltiplas substituições de aminoácidos nas inserções externas entre cadeias. As análises de acoplamento permitiram ainda prever o provável sítio de interação entre as proteínas Vp54 na formação dos trímeros capsoméricos. Este estudo evidencia a importância de considerar diferentes isolados para revelar a real diversidade genética desses vírus e apresenta ferramentas e pipelines que poderão ser aplicados na investigação de outras proteínas estruturais de chlorovírus em estudos futuros.

Apoio financeiro: NSF, UNCISGP, PRPq-UFMG, CAPES, FAPEMIG

Palavras-chave: Chlorovirus, capsídeo, diversidade, estrutura, bioinformática, AlphaFold2