

PROSPECÇÃO BIOINFORMÁTICA DE UMA LECTINA DE *Leishmania infantum* COM POTENCIAL APLICAÇÃO FARMACOLÓGICA

Juliana Freitas de Sousa ¹
Carla Rayanne Andrade Ferreira ¹
Daniel Lopes Araújo ¹
Marcia Almeida de Melo ²

¹Programa de Pós-Graduação em Ciência e Saúde Animal, Universidade Federal de Campina Grande (UFCG)

²Professora Titular da da Universidade Federal de Campina Grande (UFCG)

RESUMO

As lectinas são proteínas capazes de reconhecer e se ligar de maneira seletiva e reversível a carboidratos presentes em glicoconjugados. *Leishmania infantum*, agente etiológico da leishmaniose visceral nas Américas, representa um sério problema de saúde pública e veterinária. A identificação de moléculas-alvo específicas e essenciais do parasita é uma estratégia fundamental para o desenvolvimento de novos fármacos, direcionando-se a proteínas que não possuam homólogos no hospedeiro, minimizando efeitos adversos. O problema central do trabalho foca na carência de informações estruturais e funcionais sobre proteínas de ligação a carboidratos neste patógeno, partindo-se da hipótese de que tal lectina desempenha funções biológicas conservadas e apresenta divergência estrutural suficiente em relação às proteínas de mamíferos para ser explorada farmacologicamente. Assim, o objetivo geral foi caracterizar, por meio de ferramentas de bioinformática, essa lectina putativa, avaliando suas propriedades físico-químicas, domínios funcionais, localização subcelular e grau de conservação evolutiva. Para isso, a sequência proteica correspondente ao gene LINJ_13_0560 foi obtida do National Center for Biotechnology Information (NCBI) e analisada quanto aos parâmetros físico-químicos (ProtParam), identificação de domínios conservados (InterPro), predição de localização subcelular e presença de peptídeo sinal (DeepLoc 2.1 e SignalP 6.0), além da avaliação de homologia por alinhamentos via BLASTp contra o banco de dados de proteínas de referência (refseq_protein). Os resultados demonstraram que a proteína possui 448 aminoácidos, massa molecular aproximada de 51,6 kDa e ponto isoelétrico teórico ácido de 5,26, além da confirmação de um domínio típico de lectina (IPR005052) localizado na região N-terminal, especificamente entre os resíduos 23-248. As análises indicaram uma provável localização citoplasmática e natureza solúvel, sem evidências claras de peptídeo sinal, apesar de uma sugestão secundária de possível localização nuclear. O BLASTp revelou maior similaridade com proteínas de outros cinetoplastídeos, como *Trypanosoma*, *Leptomonas* e *Porcisia*, além de homologias parciais com insetos, crustáceos, aracnídeos, peixes e outros protistas, sem identidade ou cobertura completas. Esses achados indicam que a lectina analisada apresenta conservação evolutiva associada a funções essenciais do parasita e ausência de homólogos completos no hospedeiro, sustentando seu potencial como alvo molecular promissor, embora estudos experimentais adicionais sejam necessários para confirmar sua função biológica e aplicabilidade terapêutica.

Palavras-chave: Biofármacos. Calazar. *In silico*. Terapia. Tratamento.