RESUMO APRESENTAÇÃO ORAL PADRÃO - CENTRO DE CIÊNCIAS DE SAÚDE (CCS)/FARMÁCIA

VALIDAÇÃO DE SIGNAL PEPTIDASE 1 COMO ALVO FARMACOLÓGICO EM LEISHMANIA AMAZONENSIS

Yan Borla Pires Lima Batista (yanbplbatista@gmail.com)

Ana Carolina Rennó Sodero (acrsodero@pharma.ufrj.br)

Introdução

O presente trabalho procura estudar, por ferramentas de bioinformática, a proteína Signal Peptidase de "Leishmania amazonensis" como possível alvo terapêutico (RAFATI et al. 2004).

Materiais e métodos

Para isso, foi realizado o alinhamento múltiplo no programa MEGA-X entre a sequência da proteína de interesse e proteínas de SP de outra espécies depositadas no banco de dados Uniprot. A árvore filogenética foi construída pelo programa MEGA-X. Foi também construído o modelo 3D da SP de "L. amazonensis" por modelagem ab initio realizada pelo servidor ROBETTA (BAKER et al. 2009). Cinco modelos distintos foram obtidos e validados pelos programas Procheck, Verify 3D, Prove e Errat. Dessa forma, três modelos

foram selecionados para a etapa posterior de simulação por dinâmica molecular, que ainda está em andamento.

Resultados e discussão

Três modelos foram construídos e submetidos a uma análise de dinâmica molecular, a qual ainda está em andamento. Entretanto, a filogenética aponta que há uma diferença no sítio catalítico, mas ademais a sequência ao redor está conservada.

Conclusões

O presente trabalho espera encontrar um novo alvo molecular para o combate à leishmaniose

Referências Bibliográficas:

Rafati S, Salmanian AH, Taheri T, Masina S, Schaff C, Taslimi Y, Fasel N. Type I signal peptidase from Leishmania is a target of the immune response in human cutaneous and visceral leishmaniasis. Mol Biochem Parasitol. 2004 May;135(1):13-20. doi: 10.1016/j.molbiopara.2003.12.011. PMID: 15287582.

Srivatsan Raman, Robert Vernon, James Thompson, Michael Tyka, Ruslan Sadreyev,Jimin Pei, David Kim, Elizabeth Kellogg, Frank DiMaio, Oliver Lange, Lisa Kinch, Will Sheffler, Bong-Hyun Kim, Rhiju Das, Nick V. Grishin, and David Baker. Structure prediction for CASP8 with all-atom refinement using Rosetta. (2009) Proteins 77 Suppl 9:89-99.