

133

USO DE BIOINFORMÁTICA PARA SIMULAÇÃO PROTEOLÍTICA DE PROTEÍNAS VIRAIS E ANÁLISE ESTRUTURAL DE EPITOPOS IMUNODOMINANTES. *Dinler Amaral Antunes, Gustavo Fioravanti Vieira, Jose Artur Bogo Chies (orient.) (UFRGS).*

O sistema imune realiza um verdadeiro controle de qualidade das proteínas endógenas através da rota de apresentação de antígenos, que envolve as moléculas de MHC-I e os linfócitos T CD8+. Esse é um mecanismo eficiente para a detecção de patologias celulares e sobretudo de infecções virais. Um dos passos mais importantes nessa rota é a geração dos epitopos pelo complexo enzimático proteassomo. Neste trabalho foram utilizadas ferramentas de bioinformática para a análise de proteínas virais no sentido de identificar características estruturais que possibilitam a clivagem, facilitando a geração de certos epitopos em detrimento de outros. Um banco com 69 epitopos virais foi construído, com base na literatura, servindo de fonte e referência para as análises posteriores. A busca das seqüências protéicas, referentes a cada epitopo do banco, e a simulação proteolítica destas seqüências foram realizadas, respectivamente, com os programas BLAST e NetChop 3.0. A análise estrutural foi realizada com arquivos do “Protein Data Bank” e com proteínas modeladas pelo programa GENO 3D e visualizadas no SPDBViewer. Entre os epitopos do banco, 70, 58% apresentaram clivagem em região de alça na extremidade amino-terminal, sugerindo que esta estrutura pode facilitar o acesso do proteassomo. Na extremidade carbóxi-terminal, 73, 53% dos epitopos apresentaram corte exato, demonstrando-se seqüências com sinais para um bom processamento. As percentagens são maiores quando restringimos a análise a epitopos com aminoácidos apolares na região de ancoragem ao MHC-I, corroborando dados anteriores de nosso grupo, os quais indicam a existência de um possível motivo conservado em epitopos virais e levantam a possibilidade de uso desta informação no desenvolvimento de vacinas anti-virais de amplo espectro.