

Biologia estrutural de UDP-Sulfoquinovose Sintase de *Picrophilus Torridus*

Faccin, D. G.; Verli, H.

Programa de Iniciação Científica, Centro de Biotecnologia - UFRGS, Porto Alegre, RS
<http://www.ufrgs.br/bioinfo>



Introdução

A UDP-sulfoquinovose sintase (SQD1) é uma enzima oxireductase dependente de NAD⁺ responsável por incorporar sulfeto em UDP-glicose, convertendo-a para UDP-sulfoquinovose. Esse carboidrato sulfonatado é importante na formação de SQDG, sulfolípido presente em plantas, fungos e procariontos e essencial em ambientes com escassez de potássio. Na arquea extremófila *Picrophilus torridus*, esse processo ocorre em ambientes de alta temperatura e baixo pH e poucas informações são conhecidas quanto a estrutura proteica da SQD1 nesse organismo, bem como de sua história evolutiva.

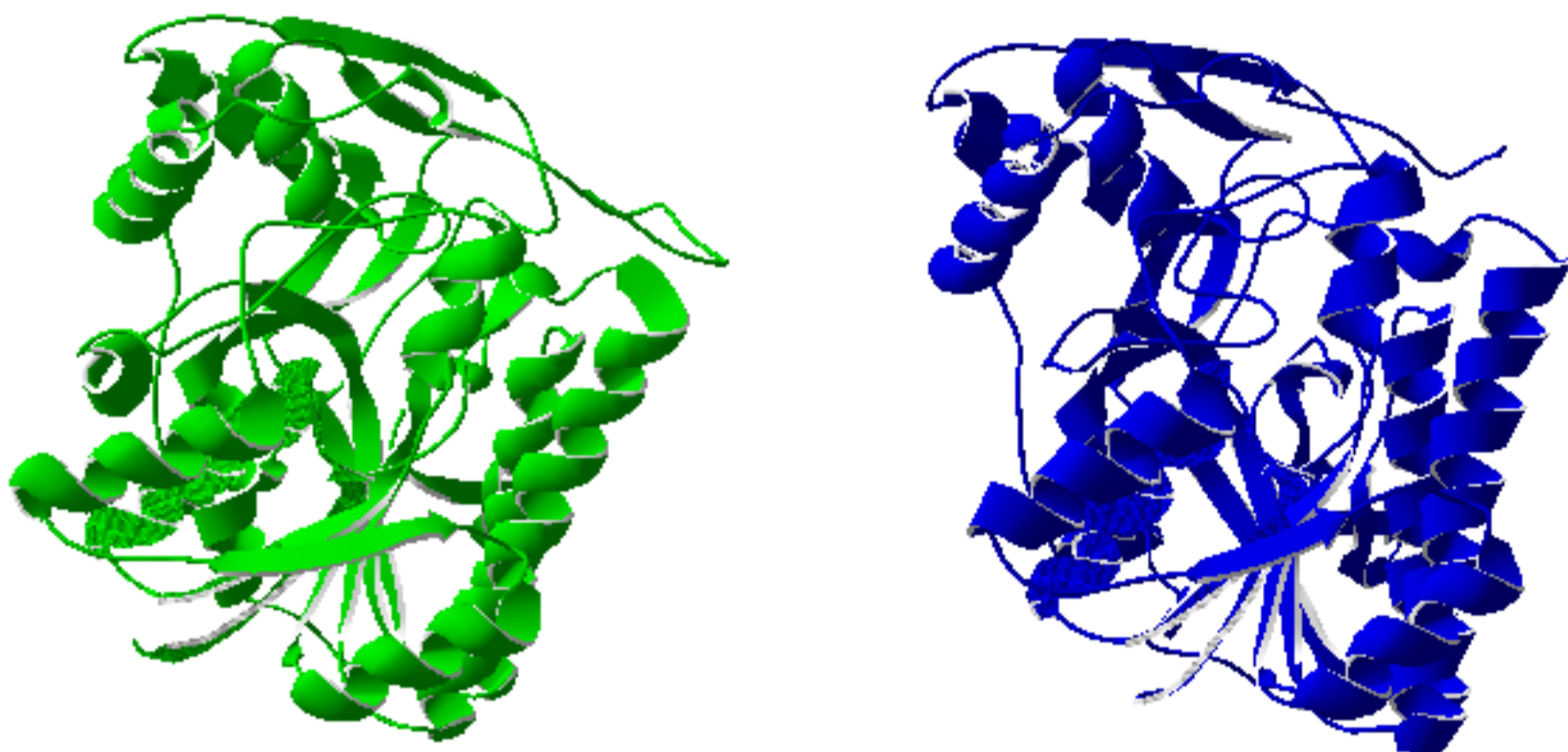


Figura 1: Modelo (em azul) da estrutura SQD1 de *P. torridus* obtido através do programa Modeller 9.17 e utilizando-se de molde a estrutura cristalográfica SQD1 de *Arabidopsis thaliana* (em verde).

Objetivos

Entender os determinantes estruturais de termoresistência da enzima SQD1 de *P. torridus*. Investigar a história evolutiva da proteína e obter maiores informações quanto suas relações de estrutura-função, com vistas à aplicação biotecnológica na glicoengenharia de proteínas.

Métodos

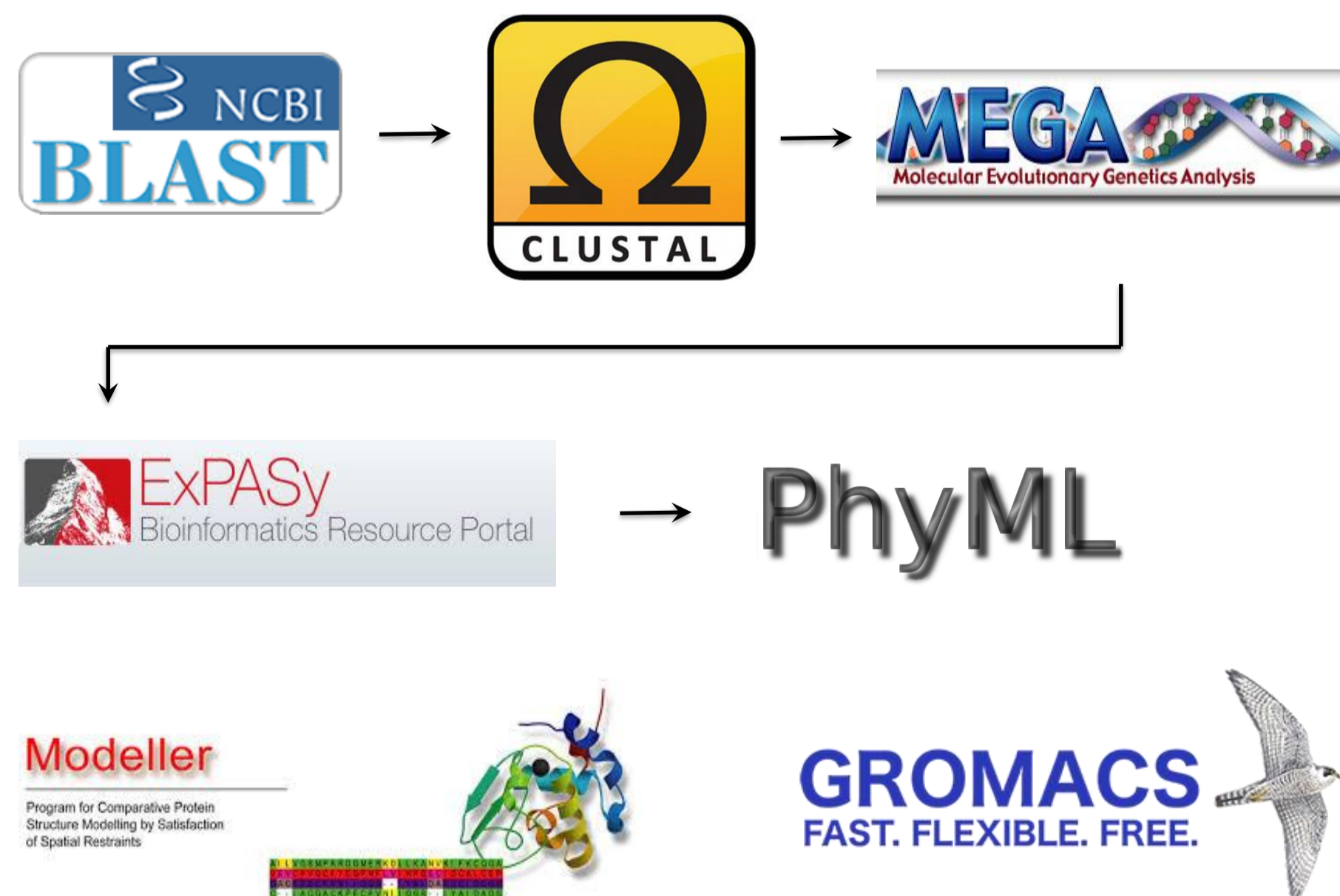


Figura 2: Utilizou-se para a construção da árvore filogenética os programas MEGA6 e PhyML3.0. As seqüências de aminoácidos utilizadas foram obtidas através do programa de buscas Blast-P. Em seguida, foram filtradas utilizando o programa Expasy - Decreasy Redundancy e foram alinhadas pelo Clustal Omega. A modelagem comparativa foi realizada no programa Modeller 9.17 utilizando como molde a estrutura da UDP-sulfoquinovose sintase de *Arabidopsis thaliana*. As dinâmicas moleculares desse modelo foram realizadas através do pacote Gromacs.

Resultados

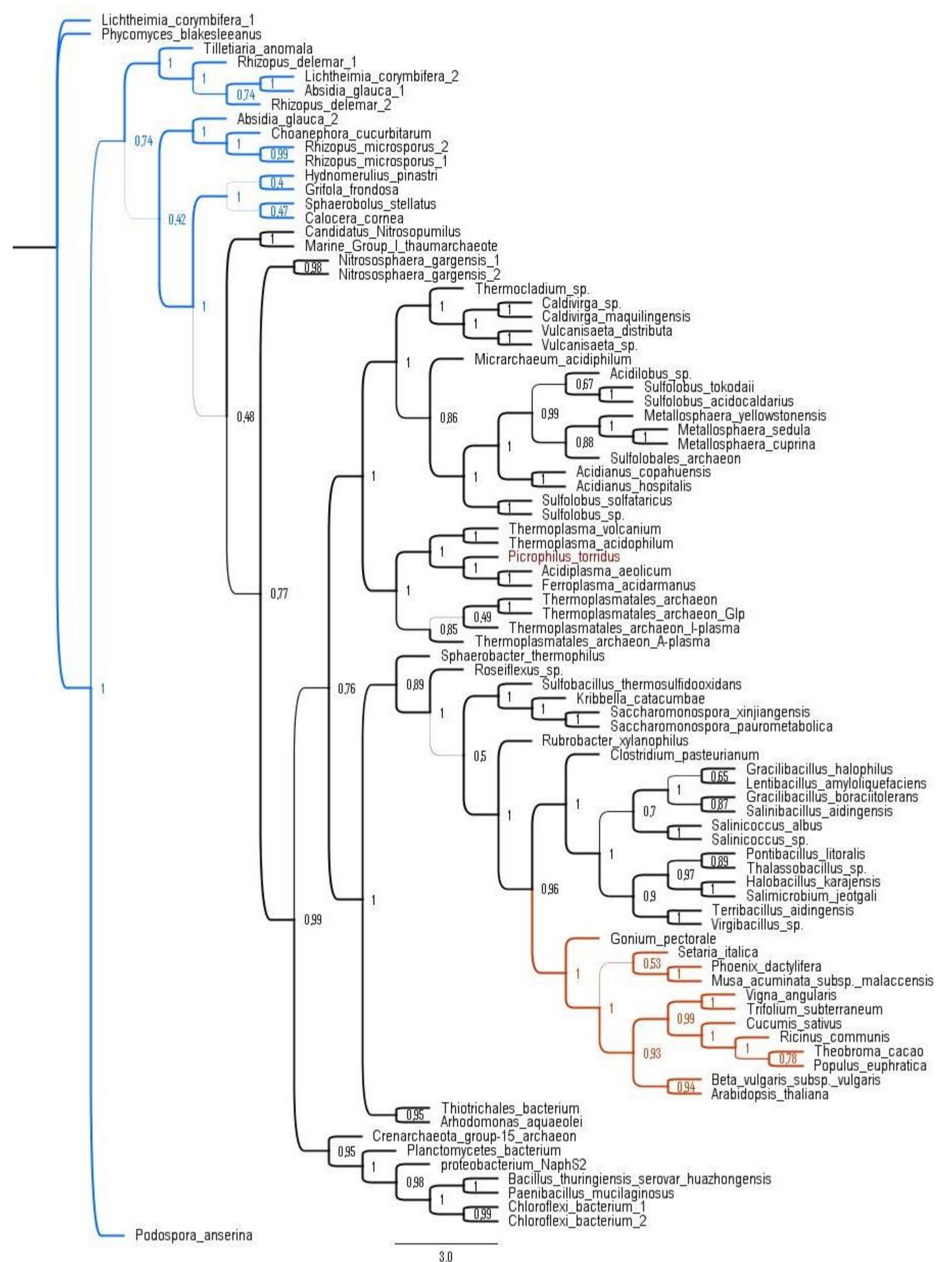


Figura 3: Árvore filogenética gerada através do método de máxima verossimilhança pelo servidor PhyML. É possível visualizar a divergência evolutiva entre os reinos de procariontos (em preto), fungos (em azul) e plantas (em vermelho).

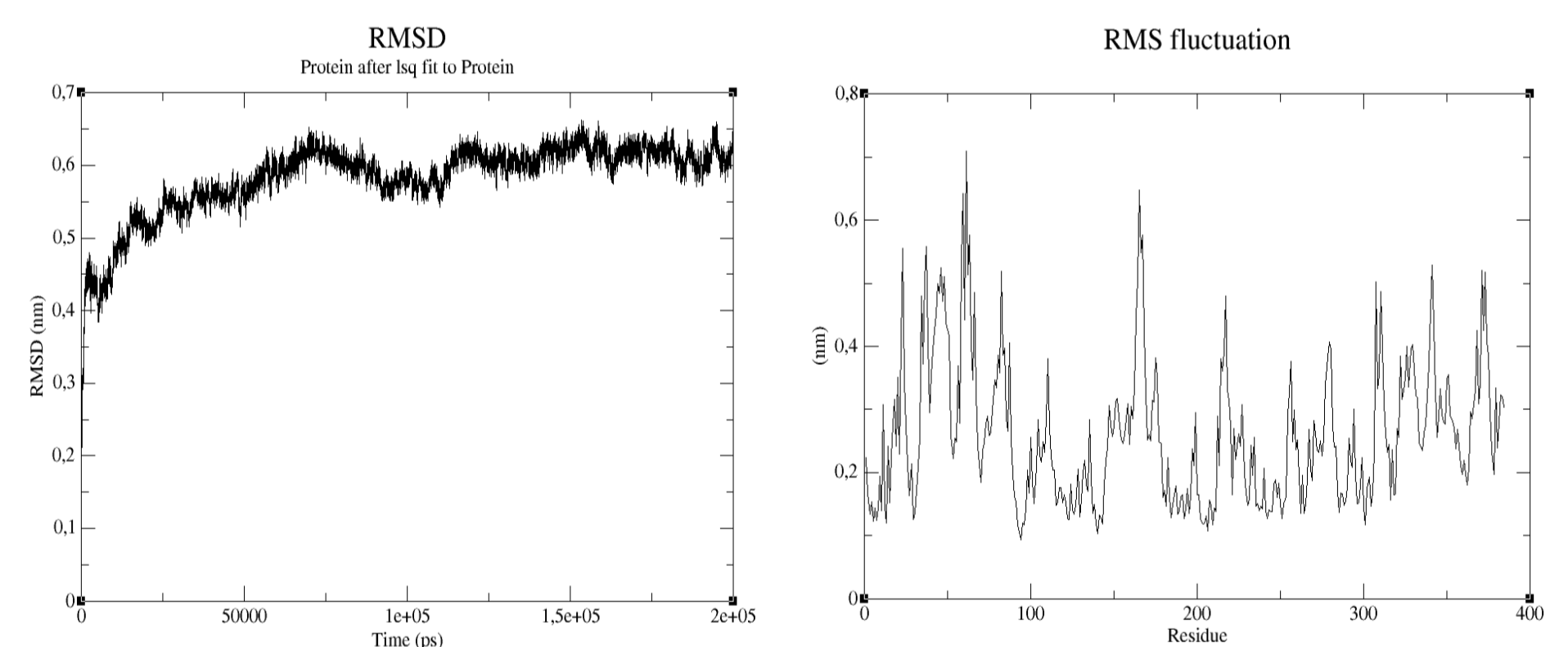


Figura 4: Análises de RMSD e RMSF da dinâmica molecular da SQD1 em 200ns, realizada à 70°C com correção na protonação das histidinas. É visível uma constante perda de estabilidade durante a trajetória.

Conclusões

- A árvore filogenética apresentou separação em reinos (fungos, procariontos e plantas) dentro do esperado e com um ótimo suporte estatístico. A distância evolutiva entre o molde e o modelo foi bem representada na árvore.

- A etapa de dinâmica molecular está em andamento. Pretende-se ainda realizar dinâmicas com variações de temperatura e dos ortólogos não-termorresistentes. Também será analisada a flexibilidade de cada um dos domínios de forma independente.

Perpectivas

- Com a elucidação do mecanismo de termorresistência da enzima poderão ser desenvolvidos novos fármacos ao realizar a transferência dessa resistência através de técnicas de glicoengenharia de proteínas.

Referências

- Endo, K., Kobayashi, K. & Wada, H. Sulfoquinovosyldiacylglycerol has an Essential Role in *Thermosynechococcus elongatus* BP-1 Under Phosphate-Deficient Conditions. *Plant Cell Physiol.* 57, 2461–2471 (2016).
- Shimajima, M. Biosynthesis and functions of the plant sulfolipid. *Progress in Lipid Research* 50, 234–239 (2011).
- Zolghadr, B. et al. UDP-sulfoquinovose formation by *Sulfolobus acidocaldarius*. *Extremophiles* 19, 451–467 (2015).