



XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

Evento	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2023
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Utilização do B-factor para a análise local de estruturas cristalográficas de alta resolução contendo carboidratos
Autor	DOUGLAS SILVA DE LIMA
Orientador	HUGO VERLI

Em trabalhos anteriores do grupo, foram realizadas análises globais sobre a informação disponível de carboidratos do *Protein Data Bank* (PDB) nas quais se buscava obter um panorama geral do seu conteúdo estrutural, da geometria das ligações glicosídicas contidas e os níveis de distorção nas hexopiranoses das estruturas experimentais. Devido a complexidade desses compostos, alguns desafios surgem quando os estudamos. Características como higroscopicidade, solubilidade e sensibilidade térmica, fazem com que seja difícil prever qual será a estrutura cristalina formada. Nos estudos realizados previamente, foram selecionadas entradas de alta resolução e que não apresentassem um alto índice de *occupancy-weighted average B-factor* (OWAB). Nesse período, uma série de modificações foram realizadas no PDB para acompanhar o crescimento de seus repositórios em quantidade e complexidade. Uma delas foi o desenvolvimento de uma nova forma de acesso às informações sacarídicas através da padronização em sua nomenclatura e uma maior consistência em sua representação, removendo obstáculos encontrados na avaliação desses dados. Nesse contexto, o trabalho busca reproduzir as análises realizadas no passado para avaliar as possíveis diferenças encontradas entre os perfis dos carboidratos, bem como ampliá-las utilizando os dados atuais do repositório na procura de novas soluções para problemas locais nas estruturas que contêm esses compostos. Para isso, foi utilizada a biblioteca Biopython para o *parsing* dos arquivos do PDB, primeiramente visando a obtenção da distribuição da informação sacarídica presente no banco. Em seguida foi avaliada a relação entre os b-factors dos monossacarídeos e os apresentados pelos aminoácidos dessas estruturas e, na medida em que a média desses valores se afasta, conseguimos selecionar estruturas que possuem regiões com uma aparente flexibilidade maior entre proteína e carboidrato. A partir disso, se procura avaliar a utilização do *b-factor* para a identificação de tais problemas locais, assim como seu impacto global na qualidade da informação cristalográfica.