

Análise *in silico* de Poligalacturonases de fungos

Adriana M. Santos* (PG), Dulce Helena F. de Souza (PQ)

adrianamsantos@gmail.com

Universidade Federal de São Carlos – UFSCar. Departamento de Química. Laboratório de Bioquímica e Biologia Molecular. Rod. Washington Luis, Km 235. Monjolinho, São Carlos, SP, CEP 13565-905

Palavras Chave: Poligalacturonases, pectinases, sequências de proteínas, alinhamento, árvore filogenética

Introdução

As pectinases (pectato liases, poligalacturonases, rhamnogalacturonases) formam um grupo de enzimas produzidas por plantas, fungos filamentosos, bactérias e leveduras que degradam substâncias pécicas, hidrolisando ligações glicosídicas ao longo da cadeia carbônica^{1,2}. Devido ao seu alto valor industrial e aplicações comerciais (alimentícia e têxtil) é crescente o estudo para o melhor entendimento sobre as atividades dessas enzimas. Uma das maneiras de estudá-las é fazer uso das ferramentas de bioinformática, que podem, através dos programas computacionais apropriados, bancos de dados de sequências e das estruturas tridimensionais, fornecerem informações interessantes sobre como as enzimas se relacionam no que diz respeito à função e evolução. O objetivo deste trabalho é analisar sequências de poligalacturonases de fungos usando ferramentas de bioinformática para avaliar o nível de similaridade sequencial entre as proteínas.

Resultados e Discussão

A busca no site NCBI (National Center for Biotechnology Information) por sequências de poligalacturonases de fungos (*fungi polygalacturonases*) mostrou 1898 sequências. Essas sequências foram analisadas e após exclusão daquelas com menos de 70 aminoácidos e das que correspondiam a 'proteína hipotética' restaram 950 sequências de poligalacturonases de fungos. Essas sequências foram separadas por gênero e espécie e para cada grupo foi realizado um alinhamento múltiplo de sequências usando o programa ClustalW³. Os alinhamentos das sequências de poligalacturonases de cada espécie foram analisados e as sequências com 100% de identidade foram retiradas. Assim, o conjunto de dados ficou com 419 sequências diferentes de poligalacturonases de fungos (tabela 1).

Através da análise de cada sequência e das informações contidas nos arquivos de sequências, as proteínas foram classificadas em *endo* ou *exo* poligalacturonases. Após essa análise algumas sequências ainda ficaram sem classificação e foi realizado um estudo mais aprofundado de similaridade sequencial para que fossem classificadas em *endo* ou *exo* poligalacturonases. Este estudo envolveu a comparação dessas

proteínas com as descritas na literatura. Para um estudo de evolução das poligalacturonases de fungos, foram construídas árvores filogenéticas. Para isso, o arquivo de entrada continha uma sequência de *endo* poligalacturonase de cada espécie. O mesmo foi realizado com *exo* poligalacturonases, resultando em outra árvore filogenética. A figura 1 mostra a árvore filogenética obtida para as *exo* poligalacturonases de fungos.

Tabela 1. Número de sequências de poligalacturonases de fungos depositadas no NCBI e número de sequências únicas por gênero.

Gênero	Número de sequências de poligalacturonases de fungos depositadas no NCBI	Número de sequências únicas de poligalacturonases de fungos
<i>Aspergillus</i>	93	93
<i>Aspergillus</i>	2	2
<i>Boltonia</i>	250	250
<i>Botryotinia</i>	13	13
<i>Chaetomium</i>	1	1
<i>Chrysosporium</i>	1	1
<i>Cochliobolus</i>	2	2
<i>Colletotrichum</i>	2	2
<i>Cyathochaeta</i>	1	1
<i>Cyrtosporium</i>	1	1
<i>Diplazium</i>	1	1
<i>Emmericia</i>	2	2
<i>Fusicladium</i>	201	201
<i>Gibberella</i>	20	20
<i>Gibberella</i>	1	1
<i>Hypocrea</i>	2	2
<i>Hypocrea</i>	1	1
<i>Kluyveromyces</i>	1	1
<i>Lepidoglyphus</i>	1	1
<i>Monascus</i>	13	13
<i>Neurospora</i>	13	13
<i>Opisthokonta</i>	14	14
<i>Penicillium</i>	14	14
<i>Phoma</i>	2	2
<i>Phoma</i>	2	2
<i>Rhizopus</i>	13	13
<i>Saccharomyces</i>	5	5
<i>Talaromyces</i>	1	1
<i>Trichostema</i>	1	1
<i>Venturia</i>	5	5
<i>Venturia</i>	1	1
Total de sequências	950	419

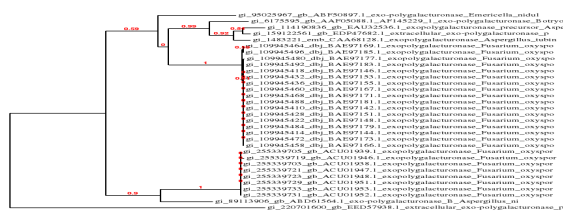


Figura 1- Árvore filogenética de *exo* poligalacturonases de fungos.

Conclusões

Neste trabalho foi realizado o estudo *in silico* de poligalacturonases de fungos. As sequências únicas foram classificadas em *endo* ou *exo* poligalacturonases de acordo com regiões conservadas. Árvores filogenéticas das duas classes de proteínas foram construídas e estão sendo analisadas com foco nas relações evolutivas entre as espécies.

Agradecimentos

CAPES e Programa de Pós-Graduação em Química da UFSCar.

1Da Silva, E.G.; Borges, M.F.; Medina, C.; Picolli, R.H.; Schwan, R.F. *FEMS Yeast Res.* 2005, 5 (9), 859-865.
 2Uendo, M. & Pastore, G.M. *Química Nova* 2007, 30 (02): 388-394.
 3Thompson J.D., Higgins D.G., Gibson T.J. *Nucleic Acids Res.* 1994, 22(22), 4673-80.