



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	NIAS-Server 2.0: uma ferramenta para a análise de preferências conformacionais de aminoácidos
Autor	ARTHUR TONIETTO MANGINI
Orientador	MARCIO DORN

No campo da biologia estrutural, a precisão dos modelos gerados de estrutura tridimensional de proteínas e peptídeos é determinante. A representação da estrutura das proteínas geralmente depende exclusivamente das coordenadas cartesianas de cada átomo, como a descrita no formato Protein Data Bank (PDB). No entanto, tal representação é por vezes insuficiente para a precisão necessária em diferentes desafios dentro do campo. Por isso, a previsão da estrutura proteica tem como objetivo gerar estruturas secundárias e terciárias apropriadas com base na sequência primária. A qualidade das estruturas previstas depende da precisão da conformação final do arcabouço da estrutura, definida pelos ângulos diédricos ϕ e ψ , assim como uma disposição adequada das cadeias laterais. Neighbors Influence of Amino Acids and Secondary Structures (NIAS) é um servidor que analisa as preferências conformacionais de aminoácidos de uma proteína. O NIAS é baseado na Lista de Probabilidade de Ângulo (APL), representando a frequência em que um determinado par (ou conjunto) de aminoácidos adota uma combinação distinta de ângulos ϕ e ψ e suas correspondentes informações de estrutura secundária, baseando-se em informações triadas e selecionadas do PDB. Cada APL é construída através de uma matriz $[-180.180] \times [-180.180]$ para cada resíduo de aminoácido e estrutura secundária associada, gerando gráficos de dispersão exibindo a população conhecida de ângulos de torção de cada sequência desejada, dependendo da escolha da APL. Nesse sentido, o APL1 produz a distribuição conhecida para um aminoácido. APL2 exibe distribuição com base na influência do aminoácido vizinho à sua esquerda ou direita. APL3 informa com base na influência de ambos os aminoácidos adjacentes. APL5, APL7 e APL9 incluem mais aminoácidos adjacentes. Portanto, essa ferramenta versátil tem diversas aplicações na biologia estrutural, como: predição de mutações, estudos da geometria do centro catalítico e métodos de predição de estruturas.