

CARACTERIZAÇÃO *in silico* DAS PROTEÍNAS OXIDASE ALTERNATIVA (AOX) DE MAMONA (*Ricinus communis* L.)

Matheus da Cruz Pimentel¹; Luana Maria Borges Mota²; Francielly Carvalho de Oliveira³; Ciro Ribeiro Filadelfo⁴; Jacqueline Araújo Castro⁵

¹Graduando em Biomedicina (FAMAM), pimentelcruz14@gmail.com; ²Estudante do Ensino Médio Integrado ao Técnico em Agroindústria (IF BAIANO), luaa.maria00@gmail.com; ³Doutoranda em Ciências Agrárias (UFRB), francielly-carvalho@outlook.com; ⁴Docente do curso de Farmácia (FAMAM), ciro@ufrb.edu.br; ⁵Docente da área Ciências Biológicas (IF BAIANO), jacque.rgv@gmail.com.

Tanto a produção de biocombustível, quanto a aplicação do óleo de mamona nos setores industriais, de cosméticos e farmacêuticos, tem agregado valor a essa cultura. Diante disso, vários estudos científicos foram desenvolvidos com a espécie, resultando, inclusive, no sequenciamento do seu genoma e transcriptoma. A partir disso, muitos desafios são apresentados, pois ao mesmo tempo em que uma quantidade grande de informação é disponibilizada, torna-se necessário a interpretação, organização e entendimento destas. Nesse sentido, o presente trabalho objetivou caracterizar *in silico* as proteínas oxidases alternativas de *R. communis*. Essa família de enzimas é caracterizada como uma segunda oxidase terminal na mitocôndria, onde os elétrons são transferidos diretamente do radical semiquinona para o oxigênio, reduzindo-o e fornecendo assim uma via alternativa de respiração celular, que confere resistência à inibição pelo cianureto, mas com a produção menor de ATPs quando comparado à via da citocromo c oxidase. Para a busca das sequências proteicas foi utilizado o banco de dados Phytozome (<https://phytozome-next.jgi.doe.gov/>). A previsão do ponto isoelétrico teórico (pI) e do peso molecular (MW) foi realizada com uso do programa ProtParam (<https://web.expasy.org/protparam/>). O domínio conservado e a superfamília das proteínas foram analisados com o software Pfam 34.0 (<http://pfam.xfam.org/>). O servidor MitoProt II (<https://ihg.gsf.de/ihg/mitoprot.html>) foi utilizado para verificação da probabilidade de exportação da proteína para as mitocôndrias. Os servidores NetPhos 3.1 (<http://www.cbs.dtu.dk/services/NetPhos/>) e NetNGlyc 1.0 (<http://www.cbs.dtu.dk/services/NetNGlyc/>) foram usados para identificar possíveis locais de fosforilação (Ser/Thr /Tyr) e possíveis locais de N-glicosilação (Asn-X-Ser/Thr), respectivamente. A análise dos motivos proteicos foi conduzida utilizando o programa MEME / MAST (<https://meme-suite.org/meme/doc/mast.html>). Foram identificadas duas proteínas oxidase alternativa em *R. communis* (30063.m001399 e 29842.m003522), que apresentaram, respectivamente: tamanho de 352 e 356 aminoácidos; presença de peptídeo sinal (PS) de endereçamento para a mitocôndria de 30 e 51aa, probabilidade de exportação para mitocôndria de 97,17% e 98,99%; massa molecular sem o peptídeo sinal de 36,86 e 35,45 kDa; ponto isoelétrico sem peptídeo sinal de 8,25 e 5,13. As duas proteínas apresentaram sítios de fosforilação: 30063.m001399 com 25 sítios (9T, 13S e 3Y) e 29842.m003522 com 41 sítios (11T,

26S e 4Y). Apenas a proteína 30063.m001399 apresentou sítio de glicosilação, com 1 sítio (1 N). Ambas, apresentaram-se constituídas apenas do domínio AOX (PF01786). Na proteína 30063.m001399 houve conservação dos quatro *motifs* (AOX: LET, LEEEA, NERMHL e RADE-H) tipicamente encontrados em outras proteínas. Por outro lado, apenas o LET foi conservado na proteína 29842.m003522. Esses quatro *motifs* altamente conservados estão relacionados à estrutura e, conseqüentemente, função da enzima AOX, pois o que caracteriza esse grupo de proteínas são os resíduos altamente conservados de glutamato (Glu) e histidina (His) que interagem com dois átomos de ferro, sendo por isso necessários para a coordenação do centro de di-ferro da enzima. A caracterização realizada no presente trabalho subsidia estudos funcionais da proteína AOX, bem como em programas de melhoramento genético voltados para seleção de genótipos que apresentem resistência ao cianureto.

Palavras-chave: Bioinformática. Análise *in silico*. Estrutura Proteica.