Simulações Multi Canônicas de Proteínas

Fernanda Azevedo[1], Rafael Bertolini Frigori[2]
[1]*Engenharia de Computação, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Paranavaí, Paraná, Brasi*l*; fazevedo@alunos.utfpr.edu.br*, [2]*Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Toledo, Toledo, Paraná, Brasil;frigori@utfpr.edu.br*

As simulações *in silico* auxiliam no estudo termo-estrutural das proteínas a fim de se obter mais informações sobre o SARS-Cov-2, responsável pelo Covid-19 (doença respiratória grave que pode ser transmitida através do ar ou contato), foi utilizado o pacote PHAST que trata-se de um pacote de código aberto que permite que o usuário simule e realize a análise termo-estatísticas micro canônicas de polímeros lineares semi-flexíveis e proteínas (via modelagem de granulação grossa), para realizar simulações de Monte Carlo a fim de realizar a simulação e a análise dos dados obtidos. O objetivo do trabalho foi realizar simulações e a análise dos dados utilizando os módulos PHAST e ANALYST do software, através da análise dos gráficos podemos concluir que o RBM da variante SARS2/WT é termodinamicamente menos estável (i.e. seu calor latente de enovelamento, ou L, é menor) do que o da "variante inglesa" B.1.1.7(α) e portanto é estruturalmente mais flexível. Dessa forma observamos que a variante α tem maior estabilidade e potencial de evadir anticorpos, portanto pior impactando o cenário pandêmico, como visto na Inglaterra, dada a sua maior infectividade.