



Evento	Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2014
Local	Porto Alegre
Título	CarbMod: uma ferramenta para construção e manipulação de carboidratos
Autor	AMANDA RIETH TORBES
Orientador	MARCIO DORN

Os carboidratos (glicanos) são biomoléculas compostas em sua maioria por átomos de carbono, oxigênio e hidrogênio. São importantes moléculas que abastecem energeticamente as células não fotossintéticas. Além disso, possuem função estrutural e atuam como reserva energética, entre inúmeras outras funções. Por existir uma grande quantidade dessas biomoléculas, há também uma grande variedade de formas e (consequentemente funções), desde formas monoméricas até grandes polímeros com centenas de unidades monossacarídicas [3].

Os carboidratos quando combinados com proteínas formam glicoproteínas e quando ligados com lipídios formam glicolipídios. As glicoproteínas são biomoléculas envolvidas em uma grande variedade de processos biológicos, como por exemplo, fertilização, defesa imunológica, replicação viral, infecções parasitárias, entre outros [2]. O processo que une a parte protéica com uma porção sacarídica é conhecido como glicosilação, e ocorre em todos os organismos conhecidos. A dificuldade no estudo destes processos de modo experimental motivou o surgimento e desenvolvimento da área da glibiologia computacional. Este campo de investigação tem como objetivo o desenvolvimento de métodos e estratégias computacionais para manipulação e estudo destas importantes biomoléculas.

Atualmente, existem várias ferramentas para manipulação e estudo de carboidratos, como por exemplo o GlycanBuilder¹. Essa ferramenta utiliza uma notação simbólica e bidimensional na interface de interação com o usuário. Segundo os desenvolvedores [1], essa forma de representação é mais facilmente reconhecida pelos humanos, porém não existe uma notação padrão, logo, vários símbolos e convenções são encontradas na literatura. Neste trabalho, apresentamos um conjunto de rotinas computacionais desenvolvidas para construção e manipulação da estrutura tridimensional (3D) de carboidratos. Uma ferramenta para construção e manipulação dessas estruturas em sua forma tridimensional permite uma visão mais intuitiva e rápida facilitando o estudo destas moléculas. As rotinas desenvolvidas utilizam o formato PDB para entrada e saída de dados e permitem a construção de estruturas complexas a partir de monômeros (acetato, glucose, leucina, etc). O algoritmo segue uma série de procedimentos a fim de cumprir as regras estabelecidas pela IUPAC² (*International Union of Pure and Applied Chemistry*). Utilizou-se a linguagem de programação Python³ para desenvolvimento das rotinas computacionais.

Referências

- [1] A. Ceroni, A. Dell, and S.M. Haslam. The glycanbuilder: a fast, intuitive and flexible software tool for building and displaying glycan structures. *Source Code for Biology and Medicine*, 2(3):1–13, 2007.
- [2] R.A. Dwek. Glycobiology: Toward understanding the function of sugars. *Chemical Reviews*, 96(2):683–720, 1996.
- [3] H. Verli. *Bioinformática da Biologia à flexibilidade molecular*. Porto Alegre, Brasil, 1 edition, 2014.

¹<http://www.unicarbkb.org/builder>

²<http://www.iupac.org>

³<https://www.python.org>