

ESTUDO BIOQUÍMICO ESTRUTURAL DA HEMOGLOBINA S (2HBS) UTILIZANDO O SOFTWARE RASMOL COMO FERRAMENTA DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL (APOIO UNIP)

Aluna: Tatiane Targino Gomes

Orientador: Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma

Curso: Fisioterapia

Campus: Bauru

Anemia Falciforme é uma alteração hematológica hereditária decorrente da troca de uma base nitrogenada do códon GAG para GTG, que resulta na substituição do Ácido Glutâmico pela Valina na posição de número 6. Em condições de hipóxia, ocorre polimerização da Hemoglobina S levando à falcização dos eritrócitos, os quais causam obstrução do fluxo sanguíneo capilar, sofrem destruição precoce e levam a um risco aumentado de infecção pulmonar, acarretando graves complicações. No intuito de realizar um estudo bioquímico estrutural da hemoglobina S, foi utilizado o arquivo 2HBS, disponível no site *Protein Data Bank*. Esse arquivo foi analisado no *software RasMol 2.7.4.2*, no qual foram observadas duas moléculas de hemoglobina S ligadas entre si. Foram obtidas também informações referentes à quantidade total de cadeias, grupos, sequências, classificações, átomos, ligações, hélices, posições e coordenadas dos átomos. Além disso, foram desenvolvidos *scripts* que permitiram a visualização do grupo heme e dos aminoácidos valina 6, fenilalanina 85 e leucina 86, envolvidos na interação entre as moléculas de hemoglobina S. Os resultados deste estudo fornecem dados bioquímicos estruturais importantes relacionados à Hemoglobina S, os quais poderão ser utilizados em futuras pesquisas relacionadas à compreensão da etiopatogenia e tratamento da Anemia Falciforme.