

Estudos in silico de famílias das fosfoenolpiruvato carboxilases de Jatropha curcas L.

Francielly Carvalho de Oliveira; Ciro Ribeiro Filadelfo; Crismeire Santana Santos Filadelfo; Jacqueline Araújo Castro; Ilneide Braz Santos de Jesus; Jaqueline Gleice de Sena Peixoto; Rosenir Silva dos Santos; Simone Alves Silva

Resumo: A *Jatropha Curcas* L. (Pinhão Manso) é uma oleaginosa que possuem sementes com um balanço energético/econômico favorável na produção de biodiesel e biolubrificantes. O metabolismo dessa planta apresenta uma menor eficiência fotossintética, pois, alterna-se nos tipos C3 e CAM com captação menor de CO₂, comparadas às de plantas C4, em temperaturas elevadas. Desse modo, é importante o desenvolvimento de estudos que envolvam a enzima fosfoenolpiruvato Carboxilase (PEPCase), visto que é uma catalisadora citosólica que favorece a uma maior fixação de dióxido de carbono nas células na presença de anidrase carbônica. Assim, o presente trabalho objetivou caracterizar *in silico* as famílias dessa enzima em *J. curcas*. As sequências de aminoácidos dos membros dessa família foram obtidas no JCDB: *Jatropha curcas Database* (jcdb.liu-lab.com). As superfamílias foram definidas pelo *Pfam* (pfam.xfam.org/). A partir do servidor ProtParam (web.expasy.org/cgi-bin/protparam/protparam) obtiveram-se as seguintes informações: ponto isoelétrico-pI, peso molecular-*MW* e grau de hidropaticidade-*GRAVY*, bem como o endereçamento celular e a predição do peptídeo sinal fornecidas pelo *SignalP* 5.0 (services.healthtech.dtu.dk/service.php?SignalP-5.0) e *DeepLoc* 1.0 (<https://services.healthtech.dtu.dk/service.php?DeepLoc-1.0>), respectivamente. O *NetSurfP* 3.0 (services.healthtech.dtu.dk/service.php?NetSurfP-3.0) foi usado para determinar os padrões de desordem e estruturas secundárias. Foram encontradas cinco sequências da PEPCase no genoma de *J. curcas* L., com tamanho de 271 a 1056 resíduos de aminoácidos. As enzimas JCDBP12137, JCDBP19448 e JCDBP16283 são pertencentes a Família PEPcase (PF00311), enquanto que JCDBP08161 e JCDBP26273 pertencem a Família Pkinase (PF00069). Em nenhuma das sequências foi encontrada região N-terminal correspondente a peptídeo sinal, mas o endereçamento para o citoplasma foi indicado para as proteínas JCDBP19448 (59%), JCDBP08161 (41%) e JCDBP26273 (37%), enquanto que JCDBP12137 (57%) e JCDBP16283 (59%) tem como provável destino o peroxissomo. O maior peso molecular observado foi de 118,83 kDa (JCDBP19448) e o menor foi de 30,21 kDa (JCDBP08161). O ponto isoelétrico variou de 5,33 a 6,32 e a maior afinidade com a água foi observada para as proteínas com endereçamento citoplasmático, com *GRAVY* variando de -0.432 a -0.419, enquanto que o valor do *GRAVY* foi de 0,039 (JCDBP08161) e -0,218 (JCDBP26273) para as proteínas destinadas ao peroxissomo, corroborando com o endereçamento sugerido. As estruturas secundárias e regiões de desordem presentes nas sequências

apresentam as seguintes distribuições: JCDBP12137 - 43 α -helices, 10 folhas- β , 3 regiões

desordenadas; JCDBP19448 - 42 α -helices, 11 folhas- β , 3 regiões desordenadas, uma delas extensa

do aminoácido 321 ao 469; JCDBP16283 - 42 α -helices, 10 folhas- β , 4 regiões desordenadas;

JCDBP08161 - 15 α -helices, 11 folhas- β , 3 regiões desordenadas; JCDBP26273 - 15 α -helices, 10

folhas- β , 2 regiões desordenadas. Os resultados apresentados são cruciais para compreensão da modulação do metabolismo C3 e CAM em resposta ao estresse hídrico ou nutricional, por exemplo, a partir da quantificação da atividade catalítica da PEPCase, que apresentam papel fundamental nesse contexto.

Palavras-chave: Bioinformática; PEPCase; Pinhão Manso; Pkinase.

Agradecimentos: FAPESB; CAPES; PETROBRAS; UFRB.