

Criação de um processo de automatização para o tratamento de dados de Espalhamento de Raios-X a baixos ângulos (SAXS) para a linha Sapucaia

Orientador: Leandro Barbosa (LNLS)

1) Introdução e Estado da Arte

A linha de luz SAPUCAIA do SIRIUS será dedicada a experimentos de Espalhamento de Raios-X a Baixos Ângulos (SAXS). Esta técnica é uma ferramenta muito útil para a caracterização estrutural de sistemas com dimensões que vão desde algumas unidades até algumas centenas de nanômetros. A técnica de SAXS permite a determinação de grandezas morfológicas que descrevem as partículas espalhadoras, como por exemplo, o tamanho, a forma e sua massa molecular, através das curvas de espalhamento (Figura 1). No caso particular de proteínas em solução, a técnica de SAXS nos permite

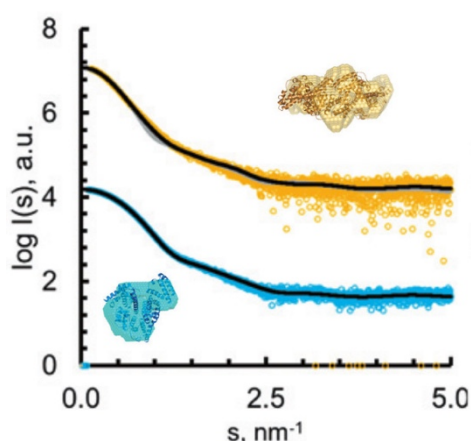


Figura 1 – Exemplos de curvas de SAXS de proteínas em solução, juntamente com os envelopes proteicos.

a possibilidade de, através de modelagens teóricas, a determinação de outras informações estruturais interessantes, como por exemplo a reconstrução do chamado envelope proteico [1,2]. Vale salientar que entender a estrutura de sistemas proteicos nos permite compreender com maior profundidade seu funcionamento e também sua função biológica [3]. *A linha SAPUCAIA será uma das mais avançadas do mundo para a caracterização de sistemas de interesse biológico, bem como de sistemas de interesse das ciências dos materiais, como nanoestruturas metálicas ou poliméricas, por exemplo.*

Além disso, é de se imaginar que existirão usuários da linha Sapucaia que necessitarão de uma pré-análise dos dados de SAXS, ainda durante a realização dos experimentos, para uma melhor otimização do restante dos experimentos. Este projeto de pesquisa, visa então, o planejamento e a criação de um sistema automatizado, baseado na linguagem Python, que irá auxiliar os usuários durante a realização de seus experimentos. Por se tratar de um projeto de Iniciação Científica, centraremos nossos esforços no desenvolvimento de uma plataforma voltada para a análise de curvas de SAXS de proteínas em solução. No entanto, este projeto será a base de uma plataforma que deverá estar a disposição de todos os usuários no futuro.

2) Análise de curvas de SAXS de Proteínas em Solução

Existem diversas ferramentas de análise de curvas de SAXS para proteínas em solução, em especial o pacote *ATSAS 3.0* [4], que vem sendo desenvolvido continuamente há algumas décadas pelo EMBL (*European Molecular Biology Laboratory*), em Hamburgo, Alemanha. Este pacote é composto por cerca de duas dezenas de subprogramas que realizam inúmeras análises e que atualmente são uma das mais utilizadas pelos pesquisadores desta área de pesquisa.

O pacote ATSAS permite desde análises mais fundamentais como determinação de tamanho,

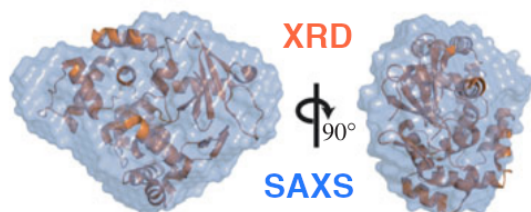


Figura 2 – Exemplos de reconstrução de envelope proteico, juntamente com as estruturas cristalográficas, mostrando a potencialidade da técnica.

forma e massa molecular das proteínas, sendo capaz de realizar até mesmo modelagens do tipo *ab initio* e de corpo rígido, para a determinação de envelope proteico [4].

Muitas linhas de SAXS ao redor do mundo oferecem aos usuários uma plataforma robusta e consistente para uma pré-análise dos dados durante as próprias medidas. Isto é bem interessante, pois

auxilia o usuário a, por exemplo, repetir um experimento, caso necessário, ou ainda aprimorar os parâmetros experimentais das medidas que sejam pertinentes.

Assim sendo, é fundamental que a linha Sapucaia ofereça algum tipo de serviço dentro deste contexto, ou seja, é fundamental que ofereçamos aos usuários uma plataforma para uma pré-análise confiável que irá nortear os usuários da linha.

3) Objetivos

O intuito deste projeto de pesquisa é: primeiramente introduzir ao aluno à técnica de SAXS para estudos de proteínas em solução, fazendo uso de ferramentas de análise bem estabelecidas e emergentes na área, dando especial foco aos programas da suíte *ATSAS 3.0* [4]. Serão utilizados dados de proteínas estudadas por laboratórios parceiros, coletados em outras instalações, e na própria linha Sapucaia. Em uma segunda etapa, espera-se que o aluno desenvolva, em colaboração com os outros pesquisadores da linha, uma plataforma baseada em Python capaz de gerar um relatório com análises preliminares das curvas de SAXS. A principal ideia é que no futuro esta rotina em Python seja disponibilizada na Linha para todos os usuários.

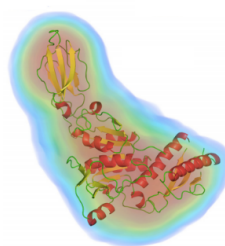


Figura 3 – Exemplo de reconstrução de envelope proteico, juntamente com a estrutura cristalográfica, mostrando as diferenças das densidades eletrônicas da proteína.

4) Metodologia

Para o desenvolvimento deste projeto espera-se que o aluno tome conhecimento da técnica de SAXS, desde os aspectos teóricos que norteiam a técnica até as análises de curvas de SAXS de

proteínas em solução. Além disso, espera-se também que o candidato tenha um conhecimento prévio de programação na linguagem Python, para a realização da segunda etapa do projeto. Seria também interessante (mas não necessário) que o candidato tenha cursado disciplinas de base da área das ciências biológicas, como por exemplo introdução à Bioquímica ou à Biologia (ou disciplinas semelhantes).

5) Público-Alvo

Este projeto é voltado para alunos que estejam, no mínimo, no 4º período do curso de graduação das seguintes áreas: Física, Química, Engenharias, Ciência da Computação, Biologia e áreas correlatas.

Referências

- [1] GRÄWERT, Tobias W.; SVERGUN, Dmitri I. *J. Mol. Biol.*, **2020**, v. 432, n. 9, p. 3078-3092.
- [2] PUTNAM, Christopher D. et al. *Q. Rev. Biophys.*, **2007**, v. 40, n. 3, p. 191-285.
- [3] NELSON, David L.; LEHNINGER, Albert L.; COX, Michael M. *Lehninger principles of biochemistry*. Macmillan, 2008.
- [4] MANALASTAS-CANTOS, K., et al. *J. Appl. Cryst.*, **2021**, 54, 343-355.



CNPq

