



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

Interacciones de la proteína *Spike* con la enzima ACE2 de diferentes animales: un estudio computacional utilizando un modelo simplificado

Sebastian Aduviri¹, Erica T. Prates², Galo E. Balatti^{1,3}, Daniel Jacobson², Carmen Domene⁴, Eliana Ascitutto⁵, Mónica Pickholz¹.

¹Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Departamento de Física, CONICET e IFIBA, ²Oak Ridge National Laboratory, Computational Systems Biology, Biosciences, Oak Ridge, TN US, ³Molecular Physics and Biophysics Group. Universidad Nacional de Quilmes Roque Sáenz Peña 352 (B1876BXD), Bernal, ⁴Department of Chemistry, University of Bath, 1 South Bldg., Claverton Down, Bath BA27AY, The United Kingdom and ⁵School of Science and Technology, National University of San Martin (UNSAM), ICIFI and CONICET, Buenos Aires, Argentina.

sebastian_ing@hotmail.com

Resumen del trabajo:

Estudios comparativos entre SARS-CoV-2 y otros coronavirus sugieren que este virus muy probablemente proviene de ancestros originados en murciélagos, transmitidos luego a un hospedador intermedio antes de extender su rango de hospedadores a humanos y otros mamíferos, principalmente primates (Shan et al., 2020; Zhou et al., 2020). La enzima convertidora de angiotensina 2 (ACE2) se postula como el principal receptor funcional para la proteína *Spike* del virus SARS-CoV-2 (Li et al., 2003; Lan et al., 2020). El rango de hospedadores de este virus puede ser bastante amplio debido a la alta conservación de esta enzima ACE2 en mamíferos (Lan et al., 2020; Lu et al., 2015).

En este trabajo estudiamos las interacciones de un sistema truncado entre las proteínas ACE2 y Spike de 6 animales (mamíferos y aves) mediante simulaciones de Dinámica Molecular. Identificamos los principales aminoácidos involucrados en la interacción, con respecto a *Spike* 15 residuos: R403, K417, Y453, L455, F456, Y473, A475, F486, N487, Y489, Q493, T500, N501, G502 y Y505, con respecto ACE2 en los 6 animales un total de 79 residuos donde cabe destacar a los más altamente conservados respecto a un alineamiento múltiple, que tomando como referencia al humano estos son: F28, E37, Y41, N330, K353, D355, R357 y R393. Nuestros resultados muestran una mayor afinidad del *Spike* por el ACE2 de los mamíferos que por el ACE2 de las aves.

Shang, C., *Cell Research*, 30, 8, 670-677.

Lan, J., *Nature*, 7807, 581, 215-220.

Lu, G., *Trends in Microbiology*, 23, 8, 468-478.

Zhou, P., *Nature*, 7798, 579, 270-273.

