



Nº 164 – MODELAGEM DA PROTEÍNA RELACIONADA À PATOGENESE 1 EM RICINUS COMMUNIS L.

HILÇANA YLKA GONÇALVES DE ALBUQUERQUE⁽¹⁾; SIMONE ALVES SILVA; JACQUELINE ARAÚJO CASTROR; CIRO RIBEIRO FILADELFO¹; FRANCIELLY CARVALHO DE OLIVEIRA¹; MONIKUELLY MOURATO PEREIRA¹; HÉLIO GONDIN FILHO¹; JAQUELINE SILVA SANTOS¹

¹Universidade Federal do Recôncavo da Bahia; ²Instituto Federal Baiano – IFBA Campus Governador Mangabeira.

OBJETIVOS

Este trabalho objetivou realizar a construção, de forma computacional, de prováveis modelos da Proteína Relacionada à Patogênese 1 (proteína-PR), nomeadas pela sigla RcPR-1.

MATERIAL E MÉTODOS

No Banco de Dados PHYTOZOME V 12.1 do genoma de *R. communis* foram identificados 10 proteínas RcPR-1 que apresentaram sequências proteicas com boa identidade com outras PRs já depositadas no *Protein Data Bank* – PDB. O modelo tridimensional previsto foi obtido usando o servidor SWISS-MODEL e o *Swiss-Pdb Viewer* v.3.7. A visualização das estruturas sobrepostas da RcPR-1 com outras depositadas no PDB, foi realizada no programa PyMOL v. 2.3.3. A qualidade estereoquímica foi calculada pelo *Procheck* versão 3.4 e no servidor *Protein Structure Analysis* - ProSa, pelos índices: *escore-Z*; *ERRAT* e *VERIFY3D*

RESULTADOS

O grau de identidade foi de 49,37 a 76,23%, com uma semelhança de 44 a 56% e uma cobertura de 60 a 99%. A qualidade estereoquímica, de acordo com o Diagrama de *Ramachandran*, com mais de 90% dos resíduos de aminoácidos RcPR-1 encontram-se nas regiões favorecidas. Os demais índices de avaliação da qualidade dos modelos tridimensionais – 3D, que levam em consideração a interação entre as moléculas gerados de forma *in silico*, permite afirmar que são dignos de confiança.

CONCLUSÃO

Estes resultados fornecem informações importantes para futuros estudos de interação planta-patógeno com possíveis fármacos-receptor/sítio ativo, pois possibilitam o melhor direcionamento nos processos de acoplamento molecular com receptores alvo de forma a auxiliar no controle de moléstias como o mofo-cinza na cultura da mamona.

AGRADECIMENTOS

À UFRB pelo espaço e laboratório, bem como à CAPES pela concessão da bolsa de estudos.