

MODELAGEM POR HOMOLOGIA DA PROTEÍNA RELACIONADA À PATOGÊNESE 1 EM *Ricinus communis* L.

Hilçana Ylka Gonçalves de Albuquerque¹; Simone Alves Silva¹; Jacqueline Araújo Castro²; Ciro Ribeiro Filadelfo¹; Francielly Carvalho de Oliveira¹; Monikuelly Mourato Pereira¹; Hélio Gondin Filho¹; Jaqueline Silva Santos¹

¹Universidade Federal do Recôncavo da Bahia. *E-mail autor apresentador: hilcana@aluno.ufrb.edu.br.

²Instituto Federal Baiano – IFBA Campus Governador Mangabeira.

A mamona (*Ricinus communis* L.) tem sido difundida e conservada no Brasil, devido a diversidade de derivados industriais que são produzidos através do seu óleo. Na Universidade Federal do Recôncavo da Bahia é mantido um Banco Ativo de Germoplasma que conserva e busca identificar resistência as principais moléstias e pragas que acometem a cultura. Portanto, este trabalho objetivou realizar a construção, de forma computacional, de prováveis modelos da Proteína Relacionada à Patogênese 1 (proteína-PR), nomeadas aqui pela sigla RcPR-1. A anotação existente no Banco de Dados PHYTOZOME V 12.1 do genoma de *R. communis* permitiu a identificação de 20 genes e suas respectivas proteínas classificados em cinco diferentes famílias: PR-1; PR-4; PR-5; PR-6 e PR-10 STH21. A partir disso, foram escolhidas as 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 programa *Swiss-Pdb Viewer* v.3.7. A visualização das estruturas sobrepostas da proteína RcPR-1c com as 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*. 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. 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-cinzento na cultura da mamona.

Palavras-Chaves: Modelo tridimensional; Qualidade estereoquímica; Análise *in silico*.

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