

A análise no QMEAN, realizada para o modelo selecionado, gerou uma pontuação de 0.76.

indicando boa qualidade, pois valores acima de 0.7 são considerados bons modelos.

Em relação aos modelos gerados por outras plataformas, quando comparados pelos gráficos de Ramachandran, todos apresentaram qualidade inferior. Sendo que os modelos do I-Tasser apresentaram baixa qualidade (Figura 2), o modelo do Swiss Model (Figura 3) apresentou qualidade superior aos obtidos no I-Tasser, mas inferior à estrutura gerada no Modeller e o modelo de melhor qualidade dentre os três foi obtido no AlphaFold, que apesar de apresentar vários *outliers* (Figura 2), todos estavam na região da alça desordenada.

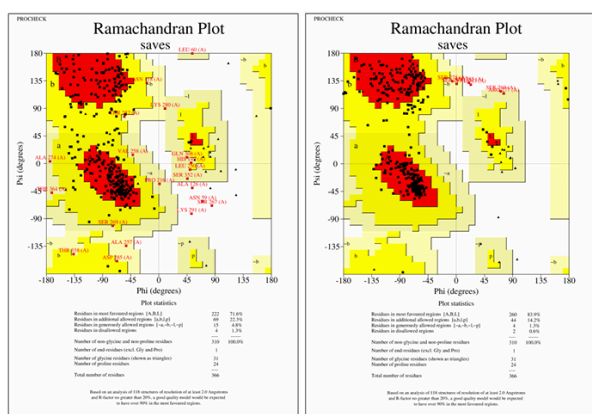


Figura 2: Gráfico de Ramachandran do melhor modelo gerado pela plataforma I-Tasser (esquerda) e da estrutura extraída da biblioteca do AlphaFold3 (direita).

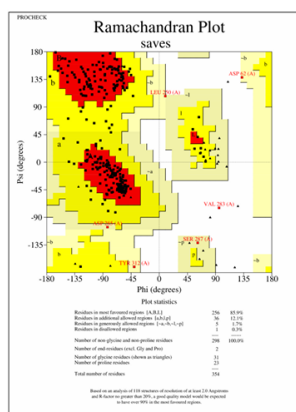


Figura 3: Gráfico de Ramachandran do modelo gerado por meio da plataforma Swiss Model.

Nas análises via QMEAN, os modelos dos demais programas, apresentaram pontuações semelhantes às do gerado no Modeller, pontuando entre 0.74 e 0.76.

Conclusões

Ao final dos experimentos, obteve-se um modelo de ótima qualidade quando gerado pelo programa Modeller. Acredita-se que esse resultado seja devido ao *software* realizar modelagem comparativa, dependendo da existência de moldes estruturais de alta identidade com a sequência alvo. Neste caso, o molde disponível de *L. Infantum*, apresenta 94% de semelhança. A possibilidade de refinar trechos específicos da proteína também permitiu melhor resultado na qualidade da estrutura.

O autor declara não haver conflito de interesses.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio do CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – Brasil, da CAPES e da FAPESP.

Referências

- 1- BENKERT, P.; BIASINI, M.; SCHWEDE, T. Toward the estimation of the absolute quality of individual protein structure models. *Bioinformatics*, v. 27, n. 3, p. 343–350, 1 fev. 2011.
- 2- HANUKOGLU, I. Proteopedia: Rossmann fold: A beta-alpha-beta fold at dinucleotide binding sites. *Biochemistry and Molecular Biology Education*, v. 43, n. 3, p. 206–209, 2015.
- 3- VERGNES, B.; SERENO, D.; TAVARES, J.; CORDEIRO-DA-SILVA, A.; VANHILLE, L.; MADJIDIAN-SERENO, N.; DEPOIX, D.; MONTE-ALEGRE, A.; OUAISSI, A. Targeted disruption of cytosolic SIR2 deacetylase discloses its essential role in Leishmania survival and proliferation. *GENE*, v. 363, p. 85-96, 2005.