

Introducción

- Las lacasas, enzimas clave en biotecnología, son útiles en biorremediación por su capacidad para degradar contaminantes persistentes.
- Los hongos *Phlebia brevispora* BAF633 y *Pleurotus pulmonarius* LBM105 de Misiones producen lacasas de baja especificidad, efectivas para tratar pesticidas, colorantes y fenoles.
- La predicción *in silico* de las estructuras tridimensionales de las lacasas de estas cepas es crucial para optimizar su uso biotecnológico y comprender mejor su mecanismo de acción.

Objetivo

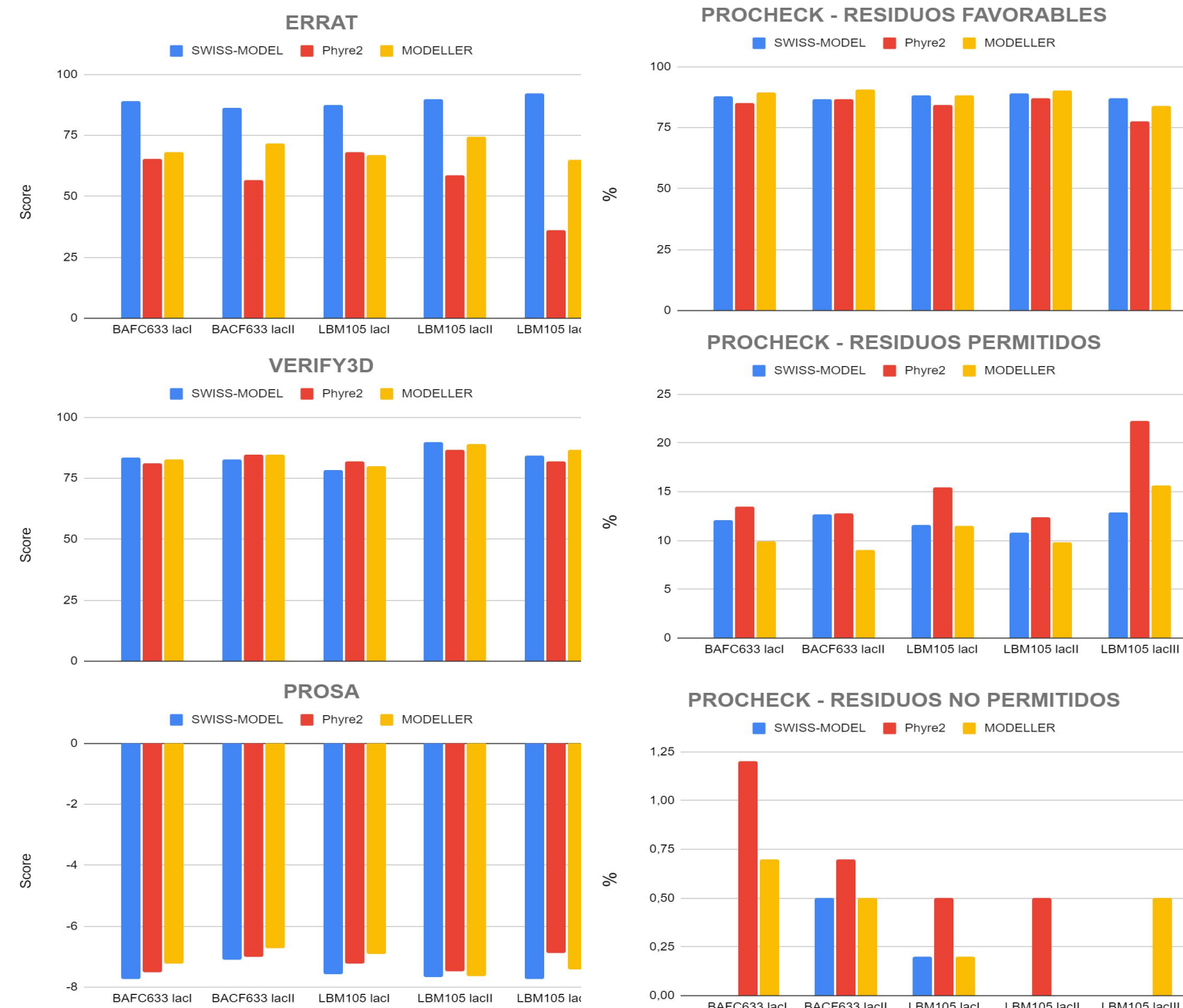
Determinar las estructuras tridimensionales de isoformas de lacasas de *Phlebia brevispora* BAF633 y *Pleurotus pulmonarius* LBM105 mediante herramientas de modelado por homología, con el fin de seleccionar el mejor modelo predicho.

Metodología

Se obtuvieron las secuencias nucleotídicas de GenBank y se predijeron las estructuras con MODELLER, SWISS-MODEL y Phyre2. Los modelos fueron validados con ERRAT, PROCHECK, VERIFY3D y PROSA.

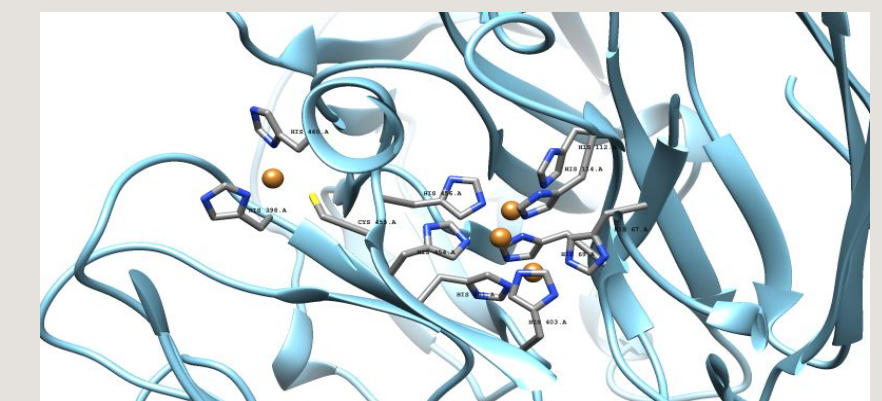
Resultados y Discusión

La diversidad en los algoritmos de búsqueda de homólogos resultó en la selección de distintas plantillas, priorizando aquellas con mayor cobertura, identidad de secuencia y parámetros de calidad según cada herramienta. En cuanto a la validación de los modelos, SWISS-MODEL y MODELLER se destacaron por sus predicciones confiables y de alta calidad. ERRAT evaluó las interacciones atómicas y la distribución, otorgando índices de calidad general cercanos a un valor de 90 para los modelos de SWISS-MODEL. PROCHECK analizó la estereoquímica de los modelos, favoreciendo aquellos generados en MODELLER y SWISS-MODEL, con una cantidad de residuos en áreas favorables superiores al 87%. VERIFY3D evaluó la compatibilidad del modelo tridimensional con la secuencia de aminoácidos sin mostrar grandes diferencias entre herramientas. PROSA, que compara la calidad del modelo con estructuras empíricas de proteínas de tamaño similar, también favoreció a los modelos de SWISS-MODEL con valores de Z-score entre -7 y -8. Similares resultados han sido observados en otros estudios, donde se ha demostrado que los métodos de modelado por homología como SWISS-MODEL y MODELLER pueden generar modelos tridimensionales con alta precisión [1-3].



Conclusiones

Los modelos obtenidos se evaluaron a través de distintos parámetros de calidad, permitiendo seleccionar los modelos de lacasas predichos por SWISS-MODEL para posteriores análisis de su interacción con contaminantes.



Sitio activo del modelo BAF633 lacl predicho por SWISS-MODEL. A la izquierda, en el sitio T1, un átomo de cobre es coordinado por los residuos His398, Cys455 y His460. A la derecha, en el sitio T2/T3, tres átomos de cobre son coordinados por los residuos His67, His69, His401, His403, His114, His112, His454 e His456. Estos constituyen los sitios de oxidación del sustrato y reducción del oxígeno, respectivamente.

Bibliografía

- Andrew Waterhouse, Martino Bertoni, Stefan Bienert, Gabriel Studer, Gerardo Tauriello, Rafal Gumienny, Florian Heer, Tjart de Beer, Christine Rempfer, Lorenza Bordoli, Rosalba Lepore, Torsten Schwede. *Nucleic acids research*, 2018.
- Lawrence A. Kelley, Stefans Mezulis, Christopher M. Yates, Mark N. Wass, Michael J.E. Sternberg. *Nature protocols*, 2015.
- E. K. Narayanan, David Eramian, Ben Webb, Min-Yi Shen, Andrej Šali. *Methods in molecular biology*, 2008.