



PREDICCIÓN IN SILICO DEL PAPEL DE LA PROTEÍNA GALECTINA-3 COMO RECEPTOR DE PATRONES ASOCIADO A PATÓGENOS EN LA INFECCIÓN DE *LEISHMANIA PERUVIANA* IN SILICO PREDICTION OF THE ROLE OF GALECTIN-3 PROTEIN AS PATTERN RECOGNITION RECEPTOR ASSOCIATED WITH PATHOGENS IN *LEISHMANIA* *PERUVIANA* INFECTION

Dulcemaria Arevalo-Ramirez¹ & Kassandra Muñoz-Guerra^{1*}

¹Facultad de Ciencias Biológicas, Universidad Nacional de Trujillo, Av. Juan Pablo II s/n – Ciudad Universitaria, Trujillo, Perú.

Dulcemaria Arevalo Ramirez



<https://orcid.org/0009-0009-1939-1172>

Kassandra Muñoz Guerra



<https://orcid.org/0000-0002-4167-4787>

Artículo Original

Recibido: 10 de junio de 2023

Aceptado: 25 de octubre de 2023

Resumen

Este estudio se centró en predecir la estructura secundaria y terciaria de la proteína Galectina-3, crucial en el reconocimiento de patrones moleculares durante la infección por *Leishmania peruviana*, mediante el empleo de herramientas computacionales como PSIPRED y ROBETTA. Se analizaron secuencias de Galectina-3 de varias especies de mamíferos, incluyendo *Homo sapiens*, *Mus musculus*, *Rattus norvegicus*, *Canis lupus familiaris* y *Macaca mulata*, usando estas herramientas. Se encontró una alta homología entre las secuencias, destacándose una correlación superior al 60% en todas las comparaciones, siendo *Canis lupus familiaris* la especie con mayor homología, registrando un 90.32%. Las predicciones estructurales ofrecieron información sobre la conformación potencial de Galectina-3 durante la infección por *Leishmania peruviana*. Los resultados revelaron similitudes estructurales y funcionales entre las Galectina-3 de diferentes especies de mamíferos, sugiriendo roles análogos en el reconocimiento de patrones moleculares durante la infección por *L. peruviana*. Estos hallazgos proporcionan una sólida base para investigaciones posteriores sobre la interacción Galectina-3-*Leishmania peruviana*, con posibles implicaciones en terapias contra la leishmaniasis.

Palabras clave: Galectina-3, estructura secundaria, *Leishmania peruviana*, patrón molecular y predicción.

Abstract

This study focused on predicting the secondary and tertiary structure of Galectin 3 protein, crucial in pattern recognition during *Leishmania peruviana* infection, using computational tools like PSIPRED and ROBETTA. Galectin 3 sequences from various mammalian species, including *Homo sapiens*, *Mus musculus*, *Rattus norvegicus*, *Canis lupus familiaris*, and *Macaca mulatta*, were analyzed using these tools. High homology was found among the sequences, notably with *Canis lupus familiaris* exhibiting the highest correlation at 90.32%. Structural predictions provided insights into Galectin 3's potential conformation during *Leishmania peruviana* infection. Results revealed structural and functional similarities among Galectin 3 proteins from different species, suggesting analogous roles in pattern recognition during *L. peruviana* infection. These findings lay a solid groundwork for further investigations into the Galectin 3-*Leishmania peruviana* interaction, with potential implications for leishmaniasis therapies.

Keywords: Galectin-3, secondary structure, *Leishmania peruviana*, molecular pattern and prediction.

*Autor para correspondencia: Email: kmunoz@unitru.edu.pe

DOI: <http://dx.doi.org/10.17268/rebiol.2023.43.02.04>

Citar como:

Arevalo-Ramirez, D., & Muñoz-Guerra, K. (2023). Predicción In Silico del papel de la proteína Galectina-3 como Receptor de patrones asociado a patógenos en la infección de *Leishmania Peruviana*. *REBIOL*, 43(2), 27-35.



1. Introducción

La leishmaniasis, una enfermedad zoonótica parasitaria causada por protozoos del género *Leishmania* (Familia Trypanosomatidae), se transmite a través de la picadura de hembras de flebótomos infectados, principalmente del género *Lutzomyia* en América. Esta enfermedad se manifiesta en diversas formas, siendo las más comunes la leishmaniasis cutánea y visceral. Estas clasificaciones pueden dividirse aún más para incluir el rango completo de enfermedades clínicas. Además, la manifestación de la enfermedad en la piel puede variar, desde casos asintomáticos o subclínicos hasta presentaciones agudas, subagudas o crónicas en diferentes individuos (Mann et al., 2021). En Perú, esta enfermedad representa una gran problemática con una tasa de incidencia anual de 13.4 casos por cada 100,000 habitantes, extendiéndose por los valles andinos e interandinos para la forma cutánea y en la selva para la forma mucosa (Cubas et al., 2019; Zorrilla et al., 2017).

Las galectinas conforman una familia de proteínas altamente conservadas a lo largo de la historia evolutiva, y desempeñan un papel fundamental en la decodificación de glicocódigos específicos involucrados en diversos eventos biológicos, como la regulación de la respuesta inmune (Rabinovich & Rubinstein, 2001). Estudios recientes han destacado el papel de la galectina-3 como receptor de reconocimiento de patrones (PRR) y patrón molecular asociado a patógenos (PAMP), evidenciando su influencia en la formación de vacuolas parasitóforas en macrófagos peritoneales de ratones, así como en la apoptosis y necrosis celular (Oliveira, 2021). Debido a la relevancia epidemiológica y clínica de la leishmaniasis, resulta crucial investigar las proteínas asociadas a esta enfermedad. La galectina-3, al actuar como un PRR, también puede reconocer virus, bacterias y protozoos, lo que sugiere su participación en la

respuesta inmune contra diversos patógenos (Oliveira et al., 2021).

Cuando se habla de la estructura secundaria de una proteína, nos referimos al plegamiento de la cadena polipeptídica gracias a la formación de puentes de hidrógeno, lo que le confiere estabilidad (Calderón, 2006). La predicción de estructuras terciarias de péptidos es fundamental para comprender los mecanismos funcionales de las proteínas. Los enfoques para predecir estas estructuras son diversos y van desde el uso de redes neuronales artificiales hasta métodos basados en el procesamiento del lenguaje natural y la visión por computadora (Wardah et al., 2019; Ismi et al., 2022).

Por lo expuesto, el presente estudio tuvo como objetivo predecir la estructura secundaria y terciaria de la proteína Galectina-3, relacionada con el reconocimiento de patrones moleculares durante la infección por vectores de leishmaniasis, específicamente frente a *Leishmania peruviana*, en cinco especies de mamíferos. Esto permitirá correlacionar la homología entre estas especies y sentar las bases para futuras investigaciones centradas en este tema.

2. Materiales y Métodos

Recuperación de secuencias

Para identificar y obtener las secuencias de la proteína Galectina-3, se utilizó la plataforma GenBank del National Centre for Biotechnology Information (NCBI). Las secuencias fueron descargadas en formato FASTA, siguiendo el procedimiento descrito por Román-Godínez et al. (2011).

Obtención de las secuencias homólogas en NCBI:GenBank.

Tras recuperar la secuencia de interés en GenBank, se procedió a obtener secuencias homólogas utilizando la misma plataforma. Dirigiéndonos a la sección de ortólogos, se seleccionaron cuatro secuencias adicionales

de mamíferos que presentaban una longitud de secuencia similar a la secuencia de referencia.

Análisis de las características fisicoquímicas

Con el fin de analizar las propiedades fisicoquímicas de la proteína Galectina-3, se utilizó el programa ProtParam. Esta herramienta permite calcular varios parámetros físicos y químicos específicos de una proteína, incluido el peso molecular, el punto isoeléctrico (pI), la composición de aminoácidos, el coeficiente de extinción, el índice de inestabilidad y el índice de hidrofobicidad (GRAVY).

El empleo de ProtParam facilitó la obtención de información relevante sobre la naturaleza y las propiedades de la proteína Galectina-3. Este análisis contribuyó significativamente al entendimiento de la estructura y función de la proteína desde una perspectiva fisicoquímica.

Predicción de estructura secundaria

Para realizar la predicción de la estructura secundaria de la proteína Galectina-3, se utilizó el programa PSIPRED. Esta herramienta proporcionó como resultados el porcentaje de láminas Beta y hélices alfa que conforman la proteína, basándose en la secuencia de aminoácidos proporcionada en formato FASTA.

Predicción de estructura terciaria

3. Resultados

De las secuencias descargadas de la proteína Galectina-3 de diferentes especies, se obtuvieron propiedades fisicoquímicas y se realizó la predicción de estructuras secundarias.

En tal sentido, en los resultados de las propiedades fisicoquímicas de las secuencias homólogas (tabla 1), se observó que la secuencia con el mayor peso molecular fue la de *Canis lupus familiaris*, con 29505.06 kDa, mientras que la de menor peso fue la de *Macaca mulata*, con un valor de 26088.16 kDa. En cuanto al parámetro del pI teórico, donde las cargas negativas y positivas de la proteína se equilibran, se observó que la secuencia con

Para predecir la estructura tridimensional (3D) de la proteína, se utilizó el servidor Robetta Full Chain Protein Structure Prediction. Este servicio ofrece métodos basados en aprendizaje profundo, como RoseTTAFold y TrRosetta, que son rápidos y precisos en la predicción de estructuras de proteínas. Robetta proporciona una base de datos de plantillas PDB como resultado de la predicción. Posteriormente, la representación gráfica de los modelos predichos se visualizó utilizando el programa RasMol (Rodriguez & Sandoval, 2015).

Validación de resultados y Comparación de resultados

La estructura terciaria refinada fue validada utilizando Saves v6.0, una herramienta de análisis de estructuras proteicas que ejecuta los programas Errat, Verify 3D y PROCHECK Ramachandran plot. Estos programas permiten evaluar la calidad y la validez de la estructura tridimensional obtenida. Posteriormente, se compararon los resultados utilizando el algoritmo CLICK, que emplea técnicas estadísticas y de teoría de grafos para identificar grupos estrechos (núcleos) de elementos muy similares. Estos grupos son probablemente pertenecientes al mismo grupo real. Este análisis comparativo proporciona una evaluación adicional de la precisión y la fiabilidad de la estructura predicha (Sharan et al., 2003).

el mayor valor fue la de *Macaca mulata* y *Rattus norvegicus*, ambas con 8.59, mientras que la de menor pI fue *Canis lupus familiaris*, con 7.78. En los parámetros siguientes, como el coeficiente de extinción y el índice de estabilidad, *Canis lupus familiaris* obtuvo los mayores valores, con 38850 y 43.49 respectivamente. Por otro lado, en el último parámetro evaluado, esta misma secuencia obtuvo el menor valor, con -0.5011.

Tabla 1

Propiedades fisicoquímicas de Galectina-3 y sus secuencias homólogas

Nº	NCBI(ID)	Peso molecular (kDa)	pI teórico	Coefficiente de extinción	Índice de inestabilidad	GRAVY
1	NP_002297.2	26152.54	8.58	35870	28.67	-0.395
2	NP_001139425.1	27514.87	8.47	31860	37.63	-0.445
3	NP_114020.1	27201.53	8.59	34380	35.26	-0.412
4	NP_001183972.1	29505.06	7.78	38850	43.49	-0.511
5	XP_014999192.1	26088.16	8.59	35870	34.69	-0.434

Nota: ProtParam: pl: punto isoeléctrico, GRAVY: por sus siglas en inglés, Grand Average of Hydropathicity (Gran promedio de hidrofobicidad). 1= *Homo sapiens*; 2= *Mus musculus*; 3= *Rattus norvegicus*; 4= *Canis lupus familiaris*; 5= *Macaca mulata*.

Asimismo, en la tabla 2, se observó que el aminoácido más abundante en la proteína Galectina-3 es la asparagina (Asn), con un total de 14 residuos, lo que representa el 10.1% del total de aminoácidos. Le siguen en abundancia la leucina y la valina, con un total de 13 residuos cada una, equivalente al 9.4% del total de aminoácidos.

Tabla 2
Propiedades físicoquímicas de Galectina-3 de Homo sapiens

Aminoácidos	Residuos	Porcentaje
Ala (A)	6	4.3 %
Arg (R)	9	6.5 %
Asn (N)	14	10.1 %
Asp (D)	7	5.1 %
Cys (C)	1	0.7 %
Gln (Q)	4	2.9 %
Glu (E)	6	4.3 %
Gly (G)	8	5.8 %
His (H)	4	2.9 %
Ile (I)	10	7.2 %
Leu (L)	13	9.4 %
Lys (K)	8	5.8 %
Met (M)	2	1.4 %
Phe (F)	8	5.8 %
Pro (P)	10	7.2 %
Ser (S)	6	4.3 %
Thr (T)	5	3.6 %
Trp (W)	1	0.7 %
Tyr (Y)	3	2.2 %
Val (V)	13	9.4 %
Pyl (O)	0	0.0 %
Sec (U)	0	0.0 %

En la predicción de la estructura secundaria (tabla 3), se asignaron colores específicos para representar diferentes elementos estructurales: el color amarillo indica la presencia de estructuras de hoja β -plegada, el color rosado indica alfa-hélices, y el color gris representa regiones en coil. Para la proteína Galectina-3 en *Homo sapiens* (Figura 1), se observa un porcentaje de alfa-hélice del 3.2%, una hoja β -plegada del 28.8%, y un coil del 68%

del total. De manera similar, en otras especies como *Mus musculus* (Figura 2), se encontraron porcentajes de alfa-hélice del 3.03%, hoja β -plegada del 26.89%, y coil del 70.08%; en *Rattus norvegicus* (Figura 3), se obtuvieron porcentajes de alfa-hélice del 3.05%, hoja β -plegada del 28.24%, y coil del 68.71%; en *Canis lupus familiaris* (Figura 4), se registraron porcentajes de alfa-hélice del 2.44%, hoja β -plegada del 26.13%, y coil del 71.43%; y finalmente, en *Macaca mulata* (Figura 5), se obtuvieron porcentajes de alfa-hélice del 3.23%, hoja β -plegada del 26.61%, y coil del 70.16%.

Tabla 3
Porcentaje de estructuras alfa-hélices, hoja β -plegada, y coil, de predicciones de estructura secundaria de la proteína Galectina-3 de Homo sapiens y especies homólogas

Especies/ Estructuras	Alfa-hélices	Hoja β -plegada	Coil
<i>Homo sapiens</i>	3.2%	28.8%	68%
<i>Mus musculus</i>	3.03%	26.89%	70.08%
<i>Rattus norvegicus</i>	3.05%	28.24%	68.71%
<i>Canis lupus familiaris</i>	2.44%	26.13%	71.43%
<i>Macaca mulata</i>	3.23%	26.61%	70.16%

Figura 1
Predicción de estructura secundaria (A) y secuencia estructural secundaria (B) de la proteína Galectina-3 de Homo sapiens



Figura 2

Predicción de estructura secundaria (A) y gráfico de secuencia estructural secundaria (B) de la proteína Galectina-3 de *Mus musculus*

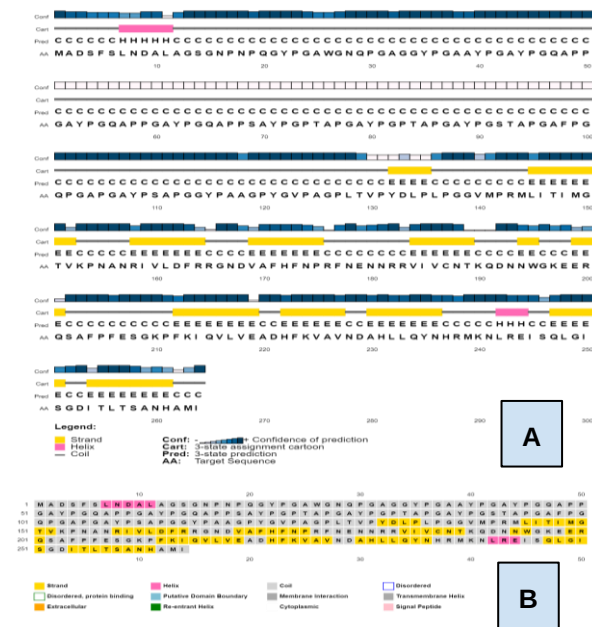


Figura 3

Predicción de estructura secundaria (A) y gráfico de secuencia estructural secundaria (B) de la proteína Galectina-3 de *Rattus norvegicus*

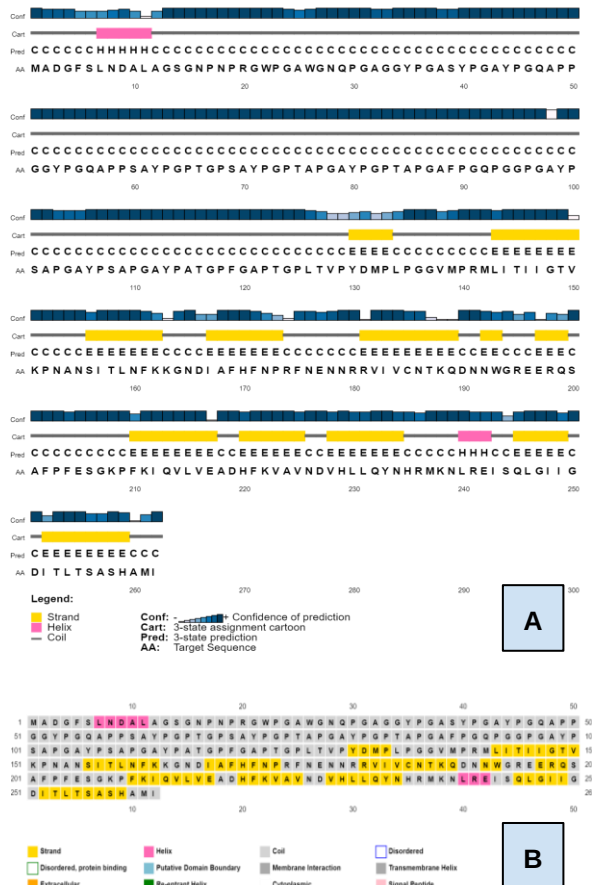


Figura 4

Predicción de estructura secundaria (A) y gráfico de secuencia estructural secundaria (B) de la proteína Galectina-3 de *Canis lupus familiaris*

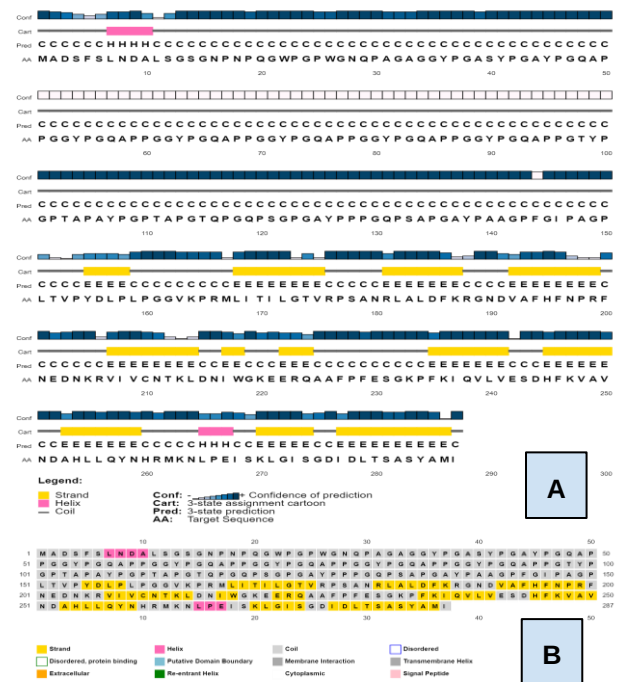
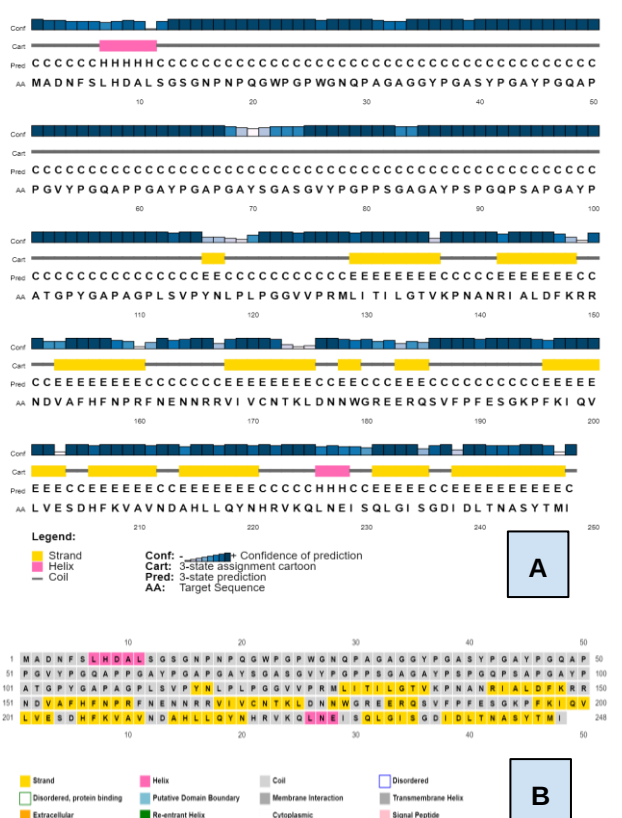


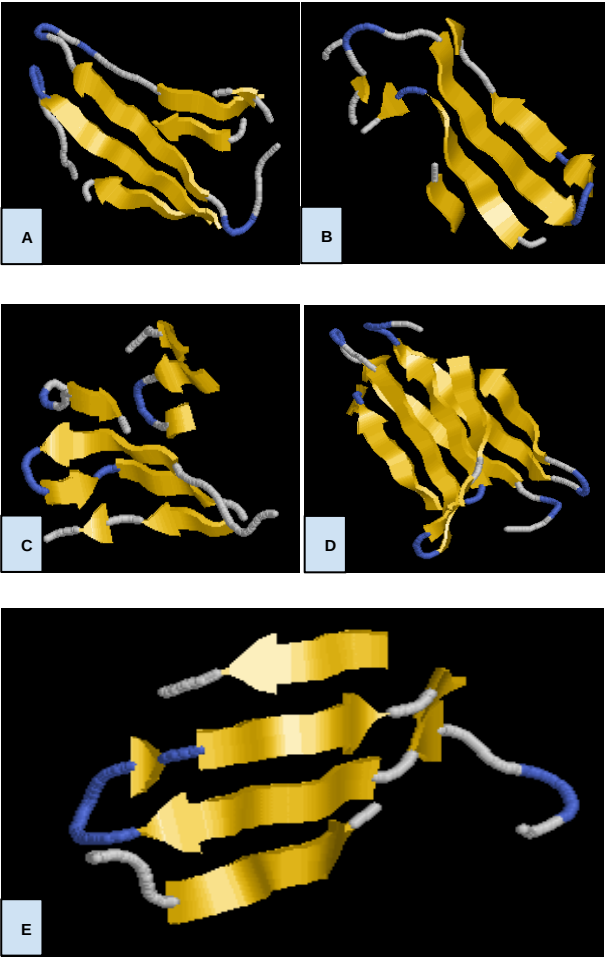
Figura 5

Predicción de estructura secundaria (A) y gráfico de secuencia estructural secundaria (B) de la proteína Galectina-3 de *Canis lupus familiaris*



Se procedió a validar los cinco modelos terciarios predichos para cada especie utilizando la herramienta Robetta (Figura 6) y la plataforma SAVES v6.0 (tabla 4). Los resultados indicaron que el mejor modelo obtenido fue el Modelo 5 para *Homo sapiens*, el Modelo 1 para *Mus musculus*, *Rattus norvegicus* y *Canis lupus familiaris*, y el Modelo 4 para *Macaca mulatta*.

Figura 6
 Modelos de estructura terciaria de Galectina-3 y homólogos de *Homo sapiens*



Nota: Visualización con el programa RasMol, *Homo sapiens* (Figura 6-A), *Mus musculus* (Figura 6-B), *Rattus norvegicus* (Figura 6-C), *Canis lupus familiaris* (Figura 6-D) y *Macaca mulatta* (Figura 6-E).

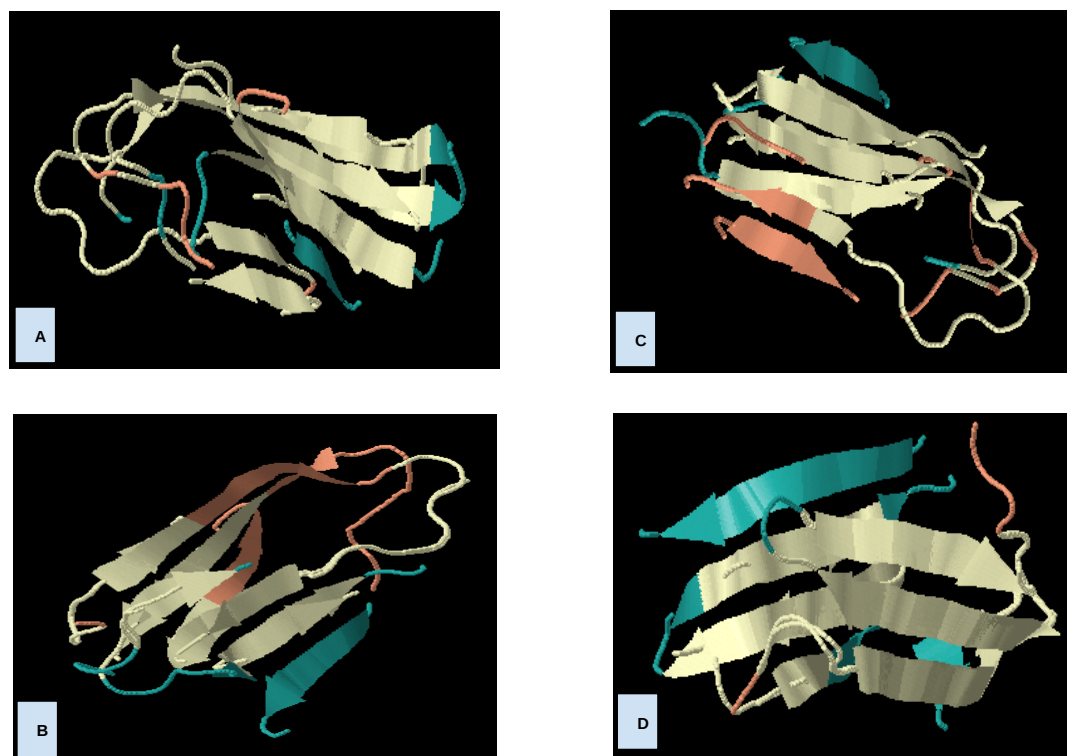
Tabla 4
 Parámetros evaluados en la validación de las cinco especies homólogas

Parámetros/ Especies	<i>Homo sapiens</i>	<i>Mus musculus</i>	<i>Rattus norvegicus</i>	<i>Canis lupus familiaris</i>	<i>Macaca mulatta</i>
Modelo seleccionado	Modelo 5	Modelo 1	Modelo 1	Modelo 1	Modelo 4
Ramachandran plot	91.3% core 8.7% allow 0.0% gener 0.0% disall	90.3% core 9.7% allow 0.0% gener 0.0% disall	81.2% core 18.8% allow 0.0% gener 0.0% disall	88.1% core 11.9% allow 0.0% gener 0.0% disall	78.8% core 21.2% allow 0.0% gener 0.0% disall
All Ramachandrans	0 labelled residues (out of 52)	0 labelled residues (out of 71)	0 labelled residues (out of 38)	0 labelled residues (out of 44)	0 labelled residues (out of 36)
Chi1-chi2 plots	0 labelled residues (out of 38)	0 labelled residues (out of 49)	0 labelled residues (out of 28)	0 labelled residues (out of 38)	0 labelled residues (out of 28)
Main-chain params	—	—	—	—	—
	5 better	5 better	5 better	5 better	5 better
Side-chain params	0 inside	0 inside	0 inside	0 inside	0 inside
	0 worse	0 worse	0 worse	0 worse	0 worse
Residue properties	Max.deviation: 2.2 Bad contacts: 0	Max.deviation: 2.0 Bad contacts: 0	Max.deviation: 2.1 Bad contacts: 0	Max.deviation: 2.1 Bad contacts: 0	Max.deviation: 1.9 Bad contacts: 0
Bond len/angle	3.2	3.4	3.0	2.8	3.6
M/c bond lengths	—	—	—	—	—
M/c bond angles	—	—	—	—	—
Planar groups	100.0% within limits 0.0% highlighted	100.0% within limits 0.0% highlighted	100.0% within limits 0.0% highlighted	100.0% within limits 0.0% highlighted	100.0% within limits 0.0% highlighted

Después de validar los resultados, se procedió a comparar las estructuras de las cuatro especies con *Homo sapiens* utilizando el algoritmo CLICK. Se observó inicialmente una superposición del 65.22% entre *Mus musculus* (representado en rosa) y *Homo sapiens* (representado en celeste como "query") (Figura 7-A). Posteriormente, se encontró una similitud del 64.81% entre *Rattus norvegicus* (rosa) y *Homo sapiens* (celeste) (Figura 7-B). La comparación entre *Canis lupus familiaris* (rosa) y *Homo sapiens* (celeste) reveló una similitud del 90.32% (Figura 7-C). Por último, la superposición entre *Macaca mulatta* (rosa) y *Homo sapiens* (celeste) mostró una similitud del 64.29% (Figura 7-D).

Figura 7

Alineación de estructuras terciarias de Galectina-3 entre *Homo sapiens* y especies homólogas: *Mus musculus* (A), *Rattus norvegicus* (B), *Canis lupus familiaris* (C) y *Macaca mulatta* (D)



4. Discusión

El análisis del peso molecular, los puntos isoeléctricos y la hidrofobicidad de la proteína Galectina-3 en las diferentes especies revela aspectos interesantes sobre su estructura y función (tabla 1). Se observa una consistencia en el rango de peso molecular, con valores que oscilan entre 26 y 30 kDa, lo que concuerda con la literatura que describe esta proteína como relativamente grande, con un peso molecular aproximado de ~30 kDa (Lautenbach et al., 2021). Además, la falta de una diferencia significativa en los puntos isoeléctricos sugiere una similitud en la carga eléctrica de estas proteínas en diferentes entornos celulares. En ese sentido, la hidrofobicidad, medida a través del Gran Promedio de Hidrofobicidad (GRAVY), muestra un patrón consistente en todas las especies, con valores negativos que indican una tendencia hacia la hidrofiliidad. Es interesante destacar que *Canis lupus familiaris* exhibe el valor más

bajo de GRAVY, lo que sugiere una mayor hidrofiliidad en comparación con otras especies, mientras que *Homo sapiens* muestra el valor más alto, indicando una relativa hidrofobicidad en esta especie en particular. Estas diferencias en la hidrofobicidad pueden tener implicaciones en la interacción de la proteína con su entorno celular y sus funciones biológicas asociadas.

La Tabla 2 detalla las propiedades fisicoquímicas específicas de la Galectina-3 en *Homo sapiens*, revelando aspectos cruciales de su composición aminoacídica. Destaca la presencia predominante de la asparagina (Asn), con un total de 14 residuos, representando aproximadamente el 10.1% del contenido total de aminoácidos en la proteína. Le siguen en abundancia la leucina y la valina, con 13 residuos cada una, lo que equivale al 9.4% del total de aminoácidos. Estos datos resaltan la relevancia de la composición aminoacídica en la estructura y función de la Galectina-3, así como en sus

interacciones moleculares y su contribución a procesos biológicos. La prominencia de estos aminoácidos sugiere su posible implicación en la regulación de la actividad biológica de la proteína, ofreciendo una perspectiva valiosa para futuras investigaciones sobre su papel en el contexto celular.

En el análisis de la predicción de la estructura secundaria de la proteína Galectina-3 (tabla 3), se observa un predominio de estructuras de hoja beta-plegada sobre las hélices alfa, con un notable porcentaje de regiones de coils (figura 1, 2, 3). Esta distribución no es inusual, ya que muchas proteínas, incluida la Galectina-3, exhiben una variedad de conformaciones secundarias para desempeñar sus funciones biológicas de manera eficiente. Las regiones de coils aportan versatilidad a la proteína, permitiendo una amplia gama de interacciones moleculares y funciones específicas en el contexto celular. La proporción relativa de hélices alfa y hojas beta en la estructura secundaria de la Galectina-3 está influenciada por diversos factores, como la composición de aminoácidos, las interacciones intra e intermoleculares, y las funciones biológicas que desempeña la proteína. Esta combinación única de factores determina la estructura secundaria específica de cada proteína, confiriéndole propiedades y funciones distintivas (de Brevern, 2020). Este hallazgo resalta la complejidad y la adaptabilidad de la Galectina-3 en su interacción con otros componentes celulares y su participación en diversas vías biológicas.

La validación de los parámetros de la estructura terciaria refinada de la proteína Galectina-3 en las especies homólogas (tabla 4 y figura 6) proporciona información crucial sobre la calidad y la precisión de los modelos generados. Uno de los parámetros clave evaluados es el Ramachandran plot, que representa las combinaciones permitidas de ángulos phi y psi en la estructura proteica. En este estudio, todos los modelos exhiben un core mayor al 75%, lo que indica que la mayoría de los residuos se encuentran dentro de las regiones permitidas del plot. Se considera que un porcentaje ideal supera el 90%, y se destaca que los modelos de *Homo sapiens* y *Mus musculus* alcanzan valores del 91.3% y 90.3%, respectivamente, dentro de esta zona permitida (Ramos, 2023). Además, se observan porcentajes más altos de aminoácidos en regiones permitidas adicionales en las

especies *Rattus norvegicus*, *Canis lupus familiaris* y *Macaca mulatta*, lo que refuerza la validez y la calidad de los modelos en estas especies. Es importante destacar que ninguno de los modelos presenta aminoácidos en regiones no permitidas, lo cual respalda la fiabilidad de las estructuras tridimensionales generadas y valida su utilidad para estudios posteriores (Hollingsworth & Karplus, 2010).

Los resultados obtenidos destacan la robustez de los modelos de estructura terciaria de la proteína Galectina-3 en las especies evaluadas, lo que constituye una base sólida para futuras investigaciones sobre la función y la interacción de esta proteína en diversos contextos biológicos. La comparación de la estructura tridimensional de la Galectina-3 de *Homo sapiens* con sus homólogos revela una similitud significativa, con una similaridad superior al 60% (Ljung & André, 2021). Esta observación sugiere la conservación estructural de la Galectina-3 a lo largo de las especies estudiadas, lo que respalda su importancia funcional y su relevancia biológica.

La alineación y concordancia estructural entre las diferentes especies (figura 7), ofrecen una valiosa herramienta para investigar la correlación entre la estructura y la funcionalidad de las proteínas. Estas correlaciones son fundamentales para comprender mejor el papel de la Galectina-3 en diversos procesos biológicos, incluida su posible asociación con patógenos como *Leishmania peruviana*. La escasez de información sobre esta asociación subraya la necesidad de investigaciones adicionales para dilucidar los mecanismos subyacentes y su relevancia clínica. Cabe destacar que durante los últimos 15 años, se ha llevado a cabo una extensa investigación sobre el papel de las galectinas, incluida la Galectina-3, en las respuestas inmunitarias innatas y adaptativas, así como en las interacciones entre el huésped y los patógenos durante la infección por *Leishmania*. El descubrimiento en 2002 del papel esencial de la Galectina-3 en la infección por *Leishmania major* marcó un hito significativo en la comprensión de la interacción entre esta proteína y los patógenos (Li et al., 2020). La asociación de la Galectina-3 con la leishmaniasis cutánea zoonótica, incluida la infección por *Leishmania*

peruviana, destaca su importancia clínica y su relevancia en entornos endémicos como el Perú (Kato et al., 2021).

5. Conclusiones

El presente estudio ofrece nuevas perspectivas sobre la correlación entre la estructura de la proteína Galectina-3 y su función en la respuesta inmune frente a la infección por *Leishmania peruviana*, mostrándose una correlación significativa, superando el 60%, entre la Galectina-3 de todas las especies comparadas.

Macaca mulatta mostró una correlación estructural más modesta, del 64.29%, con la Galectina-3. Estos hallazgos enfatizan la importancia de comprender la variabilidad estructural entre diferentes especies y subrayan el potencial de *Canis lupus familiaris* (correlación excepcional del 90.32%) como modelo relevante para investigaciones adicionales relacionadas con la función de la Galectina-3 en el contexto de la infección por *Leishmania peruviana*.

Finalmente, estos hallazgos podrían tener implicaciones significativas en el desarrollo de estrategias terapéuticas y preventivas contra esta enfermedad, así como en la comprensión más profunda de los mecanismos moleculares involucrados en la interacción huésped-parásito.

6. Contribución de los autores

Toda la investigación, desde la concepción de la idea de investigación, diseño, recolección e interpretación de datos, boceto inicial del artículo, revisión y aprobación de la versión final que se expone fue realizado por ambas autoras.

7. Conflicto de intereses

Los autores declaran que no existe conflicto de intereses.

8. Referencias Bibliográficas

de Brevern, A. G. (2020). Impact of protein dynamics on secondary structure prediction. *Biochimie*, 179, 14–22.

- Calderón, J. (2006). Proteínas: Redefiniendo algunos conceptos. *Revista de la Facultad de Medicina*, 54 (2), 143-147.
- Cubas, S., Centeno-Leguía, D., Arteaga-Livias, K., & Depaz-López, E. (2019). Revisión clínica y epidemiológica de la leishmaniasis tegumentaria en una región central del Perú. *Revista chilena de infectología*, 36(6), 707-715.
- Hollingsworth, S., & Karplus, P. (2010). A fresh look at the Ramachandran plot and the occurrence of standard structures in proteins. *BioMol Concepts*, 1(3-4), 271-283.
- Ismi, D., Pulungan, R., & Afiahayati. (2022). Deep learning for protein secondary structure prediction: Pre and post-AlphaFold. *Comput Struct Biotechnol J*, 11(20), 6271-6286.
- Kato, H., Seki, C., Kubo, M., Gonzales-Cornejo, L., & Caseres, A. (2021). Infecciones naturales de *Pintomyia verrucarum* y *Pintomyia maranonensis* por *Leishmania (Viannia) peruviana* en los Andes Orientales del norte del Perú. *Plos Neglected Tropical Diseases*, 15(4), 1-13.
- Lautenbach, V., Hosseinpour, S., & Peukert, W. (2021). Isoelectric Point of Proteins at Hydrophobic Interfaces. *Frontiers in chemistry*, 9, 712978.
- Li, F., Wang, S., Bernardes, E., & Liu, F. (2020). Galectins in Host Defense Against Microbial Infections. In: Hsieh, SL (eds) *Lectin in Host Defense Against Microbial Infections. Advances in Experimental Medicine and Biology*, 1204, 141-167.
- Ljung, F., & André, I. (2021). ZEAL: protein structure alignment based on shape similarity. *Bioinformatics (Oxford, England)*, 37(18), 2874–2881.
- Mann, S., Frasca, K., Scherrer, S., Henao-Martínez, A. F., Newman, S., Ramanan, P., & Stienen, M. N. (2021). A Review of Leishmaniasis: Current Knowledge and Future Directions. *Current Tropical Medicine Reports*, 8(2), 121–132.
- Oliveira, R., Teixeira, T., Rodrigues, C., Da Silva, M., Borges, B., Tavares, R., Teixeira, S., Santos, Servato, S., Santos, Silva, M., Luiz Ricardo Goulart, & Vieira, C. (2021). Galectin-3 plays a protective role in *Leishmania (Leishmania) amazonensis* infection. *Glycobiology*, 31(10), 1378–1389.
- Oliveira, R. (2021). *Galectina-3 desempenha um papel protetivo na infecção por Leishmania (Leishmania) amazonensis*. [Tesis de Maestría, Universidad Federal de Uberlândia Instituto de Ciências Biomédicas (ICBIM)].
- Rabinovich, G., & Rubinstein, N. (2001). Galectinas: una nueva familia de proteínas involucradas en la regulación de la respuesta inmune con implicancias en procesos inmunopatológicos. *Medicina*, 61(1), 85-92.
- Ramos, A. (2023). *Desarrollo de una vacuna oral dirigida a células M basadas en el antígeno TC24 de Trypanosoma cruzi y el ligando CO1, utilizando Schizochytrium sp. como plataforma de producción y sistema de entrega*. [Tesis de Doctorado, Centro de Investigación Biológicas del Noroeste].
- Rodríguez, L., & Sandoval, G. (2015). Caracterización in silico de la proteína Leishmanolisina (GP63) de *Leishmania braziliensis* y búsqueda de epitopes de utilidad para el desarrollo de vacunas. *Agora Rev. Cient.* 2(2), 227-232.
- Román-Godínez, I., Garibay-Orijel, C., & Yáñez-Márquez, C. (2011). Identificación de secuencias funcionales utilizando memorias asociativas. *Rev Mex Ing Biomed*, 32(2), 109-118.
- Sharan, R., Maron-Katz, A. & Shamir, R. (2003). CLICK and EXPANDER: a system for clustering and visualizing gene expression data. *Bioinformatics*, 19(14), 1787-1799.
- Wardah, W., Khan, M., Sharma, A., & Rashid, M. (2019). Protein secondary structure prediction using neural networks and deep learning: A review. *Computación Bioquímica*, 81, 1-8.
- Zorrilla, V., Vásquez, G., Espada, L., & Ramírez, P. (2017). Vectores de la leishmaniasis tegumentaria y la Enfermedad de Carrión en el Perú: una actualización. *Revista Peruana de Medicina Experimental y Salud Pública*, 34(3), 485-496.