Título de la Tesis: ANÁLISIS IN SILICO DE LA ESTRUCTURA DE Β-GALACTOSIDASA CODIFICADA POR EL GEN BGLY DE ALICYCLOBACILLUS SP. PA2

Programa: Maestría en Ciencias en Ingeniería Bioquímica

Autores

Número de CVU MC CARLOS IGNACIO LÓPEZ VELÁZQUEZ: 1033645

Número de CVU DRA. PEGGY ELIZABETH ALVAREZ GUTIÉRREZ: 216507

Número de CVU DR VICTOR MANUEL RUIZ VALDIVIEZO: 238841

Número de CVU DR. LUCIA MARIA CRISTINA VENTURA CANSECO: 206029

FECHA: MAYO 2022

RESUMEN

Hoy en día las simulaciones, visualizaciones y modelados de diferentes fenómenos biológicos se realizan de manera computacional, es decir in silico. En particular, el modelamiento se ha convertido en una herramienta importante para el análisis de las determinantes moleculares que influyen en los mecanismos de catálisis de las enzimas. Actualmente, los estudios moleculares se encuentran dirigidos hacía enzimas mesófilas, dando la oportunidad al estudio de estructuras moleculares de enzimas extremófilas. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo, fue el de analizar in silico las características moleculares y estructurales de la β-galactosidasa de Alicyclobacillus sp. PA2, que le confieren la capacidad de realizar la catálisis en condiciones termofílicas. Primeramente se obtuvo la secuenciación nucleotídica del gen Bgly a partir del ADN de Alicyclobacillus sp. PA2, el cual fue extraído con un método determinado para bacterias termófilas. Posteriormente, se modeló por homología la estructura molecular de la β-galactosidasa de Alicyclobacillus sp. PA2, se compararon sus características moleculares y estructurales con distintas βgalactosidasas tanto termófilas como mesófilas. El gen Bgly lo conforman 2065 pares de bases, los cuales constituyen 688 aminoácidos en la cadena peptídica de la proteína. El modelo tridimensional de la β-galactosidasa de Alicyclobacillus sp. PA2 obtuvo una calidad del 94.88% conforme al grafico de Ramachandran. Se pudieron identificar tres dominios altamente conservados por las β-galactosidasas termófilas estudiadas, la Glyco-hydro-42 (sitio activo), trimerización y C-terminal. Por otro lado, se observó que el contenido de prolinas influye en la termoestabilidad de las enzimas. En general, las β-galactosidasas termófilas presentaron modificaciones tanto moleculares como estructurales que disminuyen su entropía, provocando que permanezcan estables en condiciones termófilas.

Palabras clave: In silico, modelamiento, homología, termófilo