



## MODELAMIENTO TEÓRICO DE UNA ESTRUCTURA TERCIARIA PARA UNA PROTEÍNA TIPO “RIESKE” DE *Bouteloua gracilis*.

Jose L Carrillo\*, Quintín Rascón, Blanca E. Rivera, Daniel Glossman Erasmo Orrantia y Sigifredo Arévalo.  
Facultad de Ciencias Químicas Estudios de Posgrado, UACH, Cd. Universitaria s/n, CP 31070, Apartado postal 1542-C. Chihuahua, México. (614) 414-4492 \*a141292@uach.mx

*Palabras clave:* *Bouteloua gracilis*, Estructura 3D, Modelamiento.

**Introducción.** Los datos experimentales de Cristalografía de Rayos X y Resonancia Magnética Nuclear, necesarios para la construcción de un modelo tridimensional de una proteína, presentan dificultades técnicas y económicas. Se han desarrollado varios métodos para la predicción de estructuras proteicas, que se pueden clasificar en tres grupos: métodos *Ab initio*, “threading” y por homologías. En el laboratorio de biotecnología de la Facultad de Ciencias Químicas estamos interesados en estudiar la participación que puedan tener genes celulares en respuesta al estrés hídrico en plantas. Se han clonado y secuenciado un número de genes de una gramínea, *Bouteloua gracilis*, que se expresan diferencialmente en esta condición (Rascón Cruz, resultados no publicados). Una clona de interés corresponde a un miembro de una familia de genes nucleares denominados “Rieske”; se ha reportado que esta familia participa en el transporte de electrones a nivel mitocondrial y cloroplastídico (1).

El objetivo de este trabajo es proponer y evaluar una estructura tridimensional para la proteína tipo Rieske de *Bouteloua gracilis*, utilizando herramientas de modelamiento teórico.

**Metodología.** La predicción 1D se obtuvo a partir de la secuencia de DNA (*EXPasy server*). La clasificación de la proteína se realizó por *PSI-BLAST*. Los alineamientos múltiples de la proteína vs proteínas *Rieske* se efectuaron por medio de *CLUSTAL X*. Para las predicciones y alineamientos 2D se utilizaron los servidores *jNet*, *PHD* y *I23D+*. Las estructuras 3D se construyeron por métodos “threading” (2) con el programa *Modeller 9v1*(3).

**Resultados y discusión.** En la predicción 1D se obtuvo la secuencia: RGSIAWSRPRYKNQVFAIENRSPAEGAYTE GLLNAKLTQDGCIVCPSTDSTFDLRTGEIKEWYPKNP VLRALTPALRKLFTYRVKTDEENIYISFSGADGAGSAE IIFSGKAQPGVTASDVNVEEVRMVVDEDEDVGGFGFTSD NELINGKAAIIGFLLLDIFELLTGKGLLKGTGFLDFIYA VSGAFN (187 aminoácidos). La secuencia mostró homología con 2 proteínas Rieske de *Oryza sativa* y *Arabidopsis thaliana*, para las cuales no se han reportado ningún tipo de estructuras 3D. Se realizaron alineamientos múltiples entre la secuencia problema y miembros de la familia Rieske. A partir de los datos de los alineamientos múltiples, se predijo la estructura 2D, encontrándose una considerable cantidad de estructuras tipo Beta plegada, tal como se ha reportado en la familia Rieske (PDB).

Para construir los modelos 3D de la proteína Tipo Rieske de *B. gracilis*, se utilizaron los datos estructurales de las

proteínas *d1fqta*, *d1vm9a* y *1cz01\_a* (PDB ID). Los modelos construidos por medio de *Modeller 9v1* se visualizaron por medio de los programas *RasMol 2.7.3* y *UCSF Chimera v1.23* (Fig. 1).



Fig. 1. Estructuras obtenidas por Modelamiento “threading”.  
Moldes: A. 1FQT, B. 1VM9, C. 1Z01.

**Conclusiones.** Se proponen tres modelos 3D para la proteína tipo Rieske de *B. gracilis*, obtenidos por modelación teórica. Los alineamientos 1D revelaron una homología de secuencia lejana con otros miembros de la familia Rieske. Los alineamientos 2D muestran que la proteína posee estructura beta plegada predominante, al igual que los miembros de la familia. Los alineamientos de la proteína en *BLAST*, muestran homologías con dominios propios de proteínas ferrosulfuradas y de unión a metales, entre otros.

**Agradecimiento.** Programa de Posgrado Facultad de Ciencias Químicas UACH, CIMAV y CONACYT por la beca otorgada a JLC.

### Bibliografía.

1. Iwata, S., Saynovits, M., Link, T.A. and Michel, H. 1996. Structure of a water soluble fragment of the ‘Rieske’ iron-sulfur protein of the bovine heart mitochondrial cytochrome *bc1* complex determined by MAD phasing at 1.5 Å resolution. *Structure*. 4, 567-579
2. Marabotti, A., D’Auria, S. (2004) Theoretical model of the three-dimensional structure of a sugar-binding protein from *Pyrococcus horikoshii*: structural analysis and sugar-binding simulations *Biochem. J.* 380, 677–684
3. Sali A. y Blundell T.L. (1993) Comparative protein modelling by satisfaction of spatial restraints. *J. Mol. Biol.* 234, 779-815,