



Modelamiento molecular de la proteína MrpA del arquea *Methanosarcina acetivorans*

César Díaz Pérez¹, María del Refugio Vázquez Banda¹, Patricia Castro Moreno², María Isabel García Vieyra¹, Rafael Alejandro Veloz García¹ y Alma Laura Díaz Pérez³

1 Universidad de Guanajuato. Campus Celaya-Salvatierra, 2 Unidad de Biomedicina. Facultad de Estudios Superiores Iztacala. Universidad Nacional Autónoma de México, 3 Instituto de Investigaciones Químico Biológicas. Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo. cdp276@gmail.com

Methanosarcina acetivorans es una arquea productora de metano. Las proteínas MrpA son homólogas de NuoL del complejo I de la cadena respiratoria. *M. acetivorans* se posee una proteína MrpA, esencial para la síntesis de ATP y la producción de metano. Para conocer más sobre el mecanismo de acción de esta proteína, en este trabajo se modeló *in-silico* la proteína MrpA completa. Para modelar los dos dominios de la proteína se hizo un modelo preliminar de cada dominio con el servidor I-TASSER. Los modelos preliminares fueron usados como moldes para generar el modelo final con el programa Modeller. El modelo de los dominios de la proteína MrpA mostró que el extremo carboxilo corresponde a la subunidad J del complejo I, mientras el dominio amino tiene la estructura de la proteína transmembranal NuoL, que es la subunidad L del complejo I. NuoL tiene una extensión de 100 Å que le sirve de interconexión con las subunidades NuoM y NuoN del complejo, en MrpA es de 70 Å, ya que en *M. acetivorans* solo tiene un gen homólogo (MrpD). Se observó que se conservan los segmentos transmembranales esenciales para el transporte (TM5, TM7, TM8 y TM12). Los residuos cargados clave están conservados (K402, H252, K227 y E141). Además se localizó el túnel cargado por donde se lleva a cabo el antiporte de protones, formado por los residuos H252, K347, H343, T310, S253, R112, E141, S147, T171, K227, T255; S309, S312, Y316, H339, S401, K402, E403, T439, Y442 y S443.

Este proyecto se llevó a cabo gracias al financiamiento DAIP-Universidad de Guanajuato, proyectos 979/2016 y 169/2016.