



MODELADO 3D Y COMPARACIÓN ESTRUCTURAL DE ENZIMAS INVOLUCRADAS EN LA SÍNTESIS DE ÁCIDOS MICÓLICOS DE CEPAS MENÍNGEAS DE *M. TUBERCULOSIS*

Andrea Monserrat Negrete Paz¹, Ana Laura Guillén Nepita², Gerardo Vázquez Marrufo¹, Martín Graña³ y Ma. Soledad Vázquez Garcidueñas¹

1 Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, 2 Universidad Autónoma de Querétaro, 3 Institut Pasteur de Montevideo. anegrete.pz@gmail.com

La tuberculosis es una de las enfermedades transmisibles con mayor tasa de mortalidad a nivel mundial. El contagio de la tuberculosis se lleva a cabo por vía respiratoria, pero bajo condiciones específicas, el bacilo se disemina vía hemato-linfática hacia otros órganos, generando tuberculosis extrapulmonar, esta diseminación puede ser tomada en cuenta como un indicador de virulencia de una cepa en particular. En investigaciones, referentes a la ruta de síntesis de ácidos micólicos, se ha reportado que los genes, *pcaA* y *mmaA4* que codifican para las enzimas ciclopropano sintasa e hidroximicolato sintasa respectivamente, tienen un papel importante en la virulencia de *M. tuberculosis*. Este estudio pretende evaluar el efecto funcional de los polimorfismos encontrados en las proteínas presuntivas. A partir de 5 genomas de cepas causantes de tuberculosis meníngea, aisladas en Michoacán, se extrajeron las secuencias de los genes de interés mediante *Galaxy*. Éstas y 10 homólogas de cepas pulmonares disponibles en GenBank, fueron sometidas a alineamiento múltiple para la identificación de SNP's. Las secuencias de aminoácidos se obtuvieron utilizando el servidor *GeneMarkS*, estas secuencias fueron usadas para realizar el modelado 3D con *Swiss model* para después realizar el análisis estructural con *UCFSChimera*. Los resultados muestran que solo 1 de las cepas presenta diferencias estructurales en la hidroximicolato sintasa: es una proteína más corta, que además presenta una cavidad principal con un área, volumen y número de aberturas más elevado.