

β -D-N-ACETILHEXOSAMINIDASA EN FRUTOS DE *FRAGARIA X ANANASSA*: DE LA SECUENCIA A LA ESTRUCTURA TERCIARIA

Méndez-Yáñez, A.*; Morales-Quintana, L.

Multidisciplinary Agroindustry Research Laboratory, Instituto de Ciencias Biomédicas, Universidad Autónoma de Chile. Cinco Poniente #1670 Talca, Región del Maule. Chile.

angela.mendez@uautonoma.cl

PALABRAS CLAVE: exoglicosidasa, N-glicosilación, maduración de frutos, modelamiento molecular.

β -D-N-acetilhexosaminidasa (β -hex), es una enzima que escinde residuos de N-acetilglucosamina y N-acetilgalactosamina, en los extremos no reducidos de N-glicosilaciones de proteínas y glicolípidos neutros. β -hex se presenta como dos isozimas con diferente peso molecular: Hex A y Hex B, que pueden conformar estructuras cuaternarias como heterodímeros (subunidad α y β) u homodímeros (subunidad β). Mutaciones en la subunidad α como en la β , producen en humanos enfermedades neurodegenerativas como Tay-Sachs y Sandhoff, respectivamente. En organismos vegetales, existe evidencia que β -hex es relevante en el proceso de maduración de frutos, ya que se ha observado en especies climatéricas y no climatéricas, un incremento en los niveles de transcritos y mayor actividad enzimática a medida que el fruto madura. Adicionalmente, experimentos de RNAi del gen que codifica para β -hex, han permitido prolongar la vida útil en tomate por ~30 días y ~11 días en pimiento morrón, por lo cual, este blanco molecular se torna interesante en el área de la maduración y postcosecha de frutos, sobre todo en tiempos de crisis y cambio climático. Desafortunadamente, no existen estructuras cristalográficas de β -hex en plantas, ni de su interacción con el sustrato para comprender de forma detallada como se

desenvuelven los mecanismos moleculares en cuanto a su actividad y estructura. De acuerdo con lo anterior, es que se propone evaluar *in silico* todas las secuencias que codifican para β -hex en *F. x ananassa* y que conforman Hex A y Hex B, analizando sus cualidades desde la estructura primaria, dominios conservados, aminoácidos clave, putativos sitios de N-glicosilación, clusters hidrofóbicos y estructura terciaria. Asimismo, se propone un modelo por homología para la conformación de Hex A y Hex B, para luego generar un sistema donde se analice la dinámica molecular de la enzima con su respectivo sustrato. Como resultado, en *F. x ananassa* se encontraron dos secuencias que codifican para Hex A y cuatro para Hex B, de las cuales se puede concluir que son réplicas originadas a partir de una sola ya que se encuentran en copias de cromosomas homólogos y tienen un porcentaje de identidad aminoacídico superior al 97%. Entre Hex A y Hex B, se observó una diferencia de longitud de 42 aminoácidos, lo que como consecuencia genera diferencias estructurales y de carga, no obstante, los dominios y aminoácidos clave se conservan en ambas. Se discute adicionalmente los grupos hidrofóbicos que se conforman y su relación con la estructura terciaria de la enzima.