
MODELAMIENTO MOLECULAR DEL FACTOR DE TRANSCRIPCIÓN ANAC042
Y SU UNIÓN ESPECÍFICA A ELEMENTOS CIS-REGULATORIOS

FLAVIA LETICIA SOTO SALAZAR
INGENIERO EN BIOINFORMÁTICA

RESUMEN

La familia de proteínas NAC constituye una de las más grandes de factores de transcripción (FT) de vegetales, encontrándose en una gran variedad de plantas terrestres. Los miembros de esta familia tienen funciones biológicas diversas, participando en procesos de desarrollo embrionario, crecimiento de raíces, señalización y respuesta a estrés abiótico y senescencia .

La denominación NAC proviene del nombre de tres genes independientemente. NAM (*no apical meristem*) de *Petunia hybrid*, ATAF1,2 y CUC2 (proveniente de inglés *cup shaped cotyledon*, cotyledon en forma de copa) de *Arabidopsis thaliana*. Las proteínas de esta familia forman dímeros funcionales para unirse al ADN. Sólo una porción de las proteínas NAC ha sido estudiada a la fecha y tienen funciones diversas. Están involucradas en el desarrollo de las plantas, en la defensa, la senescencia y la respuesta a estrés abiótico, como en el caso de sequía.

Las proteínas de la familia NAC se unen a elementos cis-regulatorios del ADN a través de una cara de la estructura que se encuentra positivamente cargada. En esta tesis, se trabajó con la proteína NAC ANAC042, estudiándose su energía de unión *in silico* a diferentes elementos cis-regulatorios del ADN. Se plantea que las energías de unión a estos elementos cis-regulatorios indicarían a qué partes del ADN se une *in vivo* el factor de transcripción ANAC042.

Se modeló por homología la proteína ANAC042 utilizando como template la estructura cristalográfica de ANAC019 (código pdb 1UT7), se calculó el potencial electrostático para así corroborar la ubicación de la cara del dímero que interactuará con el ADN y se generaron modelos 3D de los elementos cis-regulatorios.

Finalmente se realizaron ensayos de acoplamiento molecular utilizando el software HAD-DOCK entre la proteína ANAC042 y los elementos cis-regulatorios. Se pudo comprobar que la zona de ANAC042 que une ADN comprende desde residuos Val115 hasta el residuo Val168 situados en el dominio NAC de la proteína. Por otro lado, las energías de interacción dan

cuenta de dónde se une el ADN *in vivo* en el factor de transcripción ANAC042 al hacer una simulación *in silico*.

Palabras Claves: ANAC042, elementos cis-regulatorios, NAC, F17d127.