



B039

### **MODELAGEM POR HOMOLOGIA DA ENZIMA CMP QUINASE DE ACIDITHIOBACILLUS FERROOXIDANS**

Marcos T. dos Santos (Bolsista FACTE), Lúcio F. C. Ferraz, Fernanda C. Reis e Prof. Dra. Laura M. M. Otoboni (Orientadora), Paula K. Falcão e Goran Neshich - (EMBRAPA), Centro de Biologia Molecular e Engenharia Genética - CBMEG, UNICAMP

*A. ferrooxidans* é uma bactéria Gram-negativa de grande importância econômica, envolvida na biolixiviação de metais. A biolixiviação pode ser afetada por vários fatores, dentre eles, alterações no pH ótimo de cultivo da bactéria (pH 1,8). Curvas de crescimento e experimentos de respirometria mostraram que tanto o crescimento quanto o consumo de oxigênio são afetados quando a bactéria é cultivada em pH 1,2 e 3,0. A análise da expressão diferencial de genes através de RAP-PCR, utilizando RNA isolado de células cultivadas em diferentes pHs, permitiu o isolamento de um cDNA com expressão mais acentuada em pH 1,8. A sequência deste cDNA apresentou similaridade com o gene *cmk* que codifica uma Citosina Monofosfato Quinase (CMP quinase). Esta enzima é essencial para o crescimento da bactéria, pois está envolvida na síntese de ácidos nucleicos. A sequência completa do gene foi obtida com base no genoma não anotado de *A. ferrooxidans* ATCC23270 ([www.tigr.com](http://www.tigr.com)). Uma busca por estruturas que poderiam ser utilizadas na modelagem desta proteína foi realizada contra um banco de dados de estruturas de proteínas. Como resultado obtivemos duas estruturas, uma CMP quinase complexada com substrato e outra em sua forma livre (identidade > 55%). Utilizando o programa de modelagem *MODELLER* foram obtidos dois modelos 3D da proteína. A análise estrutural destes modelos com o objetivo de entender o funcionamento desta enzima está sendo feita com o auxílio do programa *Gold STING*. As diferenças estruturais observadas numa primeira análise entre os dois modelos são resultado da presença do substrato.

Expressão diferencial de genes - Modelagem molecular - CMP quinase