
“CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DE LAS PROTEÍNAS FcEXPA1 Y FcEXPA2 ASOCIADAS AL DESARROLLO Y MADURACIÓN DEL FRUTO DE *Fragaria chiloensis* (L). DUCH.”

**FELIPE VALENZUELA RIFFO
INGENIERO EN BIOINFORMÁTICA**

RESUMEN

La frutilla Chilena (*Fragaria chiloensis*) es una especie nativa que surge como una nueva alternativa comercial, debido a sus excelentes características organolépticas y hortícolas, destacando la tolerancia frente a diferentes factores de estrés tanto biótico como abiótico. Su fruto es perecedero, de rápido ablandamiento, reflejado en la alteración de la textura del fruto, que influye negativamente en la vida de postcosecha y calidad de éste, limitando así su comercialización. Estudios previos han demostrado que el ablandamiento del fruto de *F. chiloensis* está relacionado con la modificación de la pared celular, mediado por un grupo de proteínas entre las que se encuentran las expansinas. Las expansinas son proteínas que inducen una disrupción reversible de los enlaces de hidrógeno existentes entre las microfibrillas de celulosa y las hemicelulosas, permitiendo la relajación de la pared celular. Hasta la fecha se desconoce a nivel molecular el modo de acción de las expansinas. Por lo tanto, con el fin de aportar nuevos antecedentes en relación a estas proteínas es que se obtuvo la estructura tridimensional de dos expansinas de *F. chiloensis* (FcEXPA1 y FcEXPA2), asociadas a la maduración del fruto de *F. chiloensis*, mediante modelado comparativo. Además, se realizó acoplamiento molecular y simulación de dinámica molecular frente a distintos sustratos del tipo hemicelulosa (XG) y celulosa, con el fin de evaluar el rol de las expansinas en la interacción con dichos sustratos. De esta forma, el estudio de la estructura de estos dos miembros de la familia de las expansinas en frutilla, nos permitió indagar comparativamente acerca de posibles diferencias estructurales y/o de interacción con sustratos entre miembros de esta familia génica.

ABSTRACT

The Chilean strawberry (*Fragaria chiloensis*) is a native species that is emerging as a new commercial alternative, due to its excellent organoleptic and horticultural traits, highlighting tolerance to biotic and abiotic stress. Chilean strawberry fruit is perishable, showing a rapid and intense softening, reflected in the alteration of the texture of the fruit, which negatively influences the postharvest life and fruit quality, thus limiting the market. Previous studies have shown that fruit softening of *F. chiloensis* is related to cell wall modification mediated by expansins protein. Expansins induce a reversible disruption of the hydrogen bonds between cellulose microfibrils and hemicellulose (xyloglucan) allowing relaxation of the plant cell wall. With the aim to gain insight about the mode of action of expansins at molecular level, the three-dimensional structure of two Chilean strawberry expansins (FcEXPA1 and FcEXPA2) will be obtained by comparative modeling. Then, molecular docking and molecular dynamics with different hemicellulose and cellulose will be performed, in order to evaluate the mode of interaction of expansins with model substrates. The structural characterization of two members of the expansins family in strawberry allows us to investigate possible differences about structure and / or substrates interaction between members of the same gene family.