

CAPITULO 8. CONCLUSIONES

El objetivo del presente trabajo fue la elaboración de un modelo tridimensional de la enzima KatG de *Mycobacterium tuberculosis*. Debido a que se disponía únicamente de la secuencia de amino ácidos, sin información sobre la estructura tridimensional correspondiente, se realizaron dos modelos por homología usando como patrón la estructura determinada por rayos X de la catalasa-peroxidasa de *Haloarcula marismortui* (HmCP, 1itk.pdb). Ella cuenta con un alto grado de homología, es decir, está filogenéticamente relacionada con MtKatG. Tras la evaluación de ambos modelos, pudo constarse que el generado automáticamente obtuvo mejores calificaciones por el programa WHAT IF, si bien la interpretación del sitio activo es factible de realizarse en cualquiera de los dos modelos.

1. Queda para un trabajo posterior el refinamiento final de la estructura manual de MtKatG.
2. Gracias al modelo actualmente disponible puede hacerse una visualización de la ubicación y estructura de los amino ácidos de interés en MtKatG.
3. Se consiguió la generación de un modelo que permite discutir cada una de las mutaciones observadas en el entorno estructural de MtKatG para relacionar defectos genéticos con resistencia bacteriana observada contra la isoniazida en el tratamiento de la tuberculosis.
4. Podrá determinarse el modo de unión de la isoniazida a la enzima, pudiendo usarse dicha información en el diseño de un nuevo fármaco.