

Investigaciones de la estabilidad estructural de proteínas utilizando dinámica molecular

Salomón de Jesús Alas Guardado

Existen organismos con la capacidad de vivir en ambientes extremos de temperatura, pH, salinidad, presión, etc. Cuando un organismo desarrolla la capacidad de adaptarse a un ambiente de temperatura mayor a los 45 °C es considerado un organismo termófilo. Por otra parte los organismos que tienen una temperatura óptima de crecimiento entre 15 y 35 °C son conocidos como organismos mesófilos. Para que los organismos termófilos persistan bajo esas condiciones extremas de temperatura es necesario que las proteínas que los conforman sigan funcionando de manera adecuada.

Se sabe que las proteínas realizan su función solo cuando se encuentran en el estado nativo, el cual es un estado tridimensional muy particular en donde la proteína se encuentra plegada y se considera la estructura más estable que puede adquirir. Cuando las condiciones ambientales como temperatura, pH, salinidad, entre otras, cambian de manera considerable la proteína se despliega y pierde la función, pasando del estado nativo a un estado desnaturalizado.

De aquí que, el estudio de los factores estructurales y fisicoquímicos que le proporcionan mayor estabilidad a una proteína para mantener su actividad a temperaturas altas ha tenido un gran impacto tanto en la generación de conocimiento en las ciencias básicas como en aplicación industrial. Esto último debido a que al aumentar la estabilidad térmica de una proteína se puede obtener un producto específico con valor agregado. Sin embargo, en la actualidad estos factores son poco conocidos.

Una manera de estudiar a tales factores es con ayuda de la simulación computacional, este tipo de herramientas como su nombre lo dice nos permiten simular, en este caso sistemas biológicos, para tratar de comprender y explicar el tipo de interacciones que contribuyen a que una proteína permanezca estable y realice su función al aumentar la temperatura. De manera particular la herramienta de simulación computacional de dinámica molecular (DM) permite estudiar de manera teórica los cambios e interacciones que ocurren en sistemas biológicos, como las proteínas, en un periodo de tiempo determinado.

Es por ello que en este seminario se presenta el análisis de la estabilidad estructural, a diferentes temperaturas, de tres proteínas procedentes de organismos termófilos utilizando DM.