

## Termodinámica de las Interacciones Proteína-Ligando y su Papel en el Diseño de Fármacos

Rafael A. Zubillaga Luna  
Departamento de Química  
Universidad Autónoma Metropolitana- Iztapalapa

Las proteínas son indispensable en todos los aspectos de la estructura y función de las células, jugando roles muy diversos y aparentemente disímiles: catalíticos, de almacenamiento y transporte, de señalización, como toxinas, agentes de defensa, etcétera. Sin embargo, un común denominador de estas funciones radica en la interacción selectiva con otras moléculas, es decir en la generación de superficies moleculares correlacionadas y complementarias con la de sus ligandos naturales con los que interacciona favorablemente, lo que representa un reconocimiento molecular.

En esta plática hablaré de la caracterización termodinámica de algunos procesos de asociación proteína-ligando y de cómo la determinación de su afinidad, no sólo a través de la constante de unión  $K_u$  del complejo o su energía libre de unión ( $\Delta G_u$ ), sino también de sus contribuciones entálpica ( $\Delta H_u$ ) y entrópica ( $\Delta S_u$ ), nos permite obtener información sobre el tipo de interacciones dominantes que producen tal afinidad y correlacionarla con los cambios estructurales asociados al proceso de unión.

También mostraré cómo esta información es relevante en el proceso de optimización de moléculas líderes, dentro del contexto del diseño racional de fármacos basado en la estructura del blanco terapéutico.