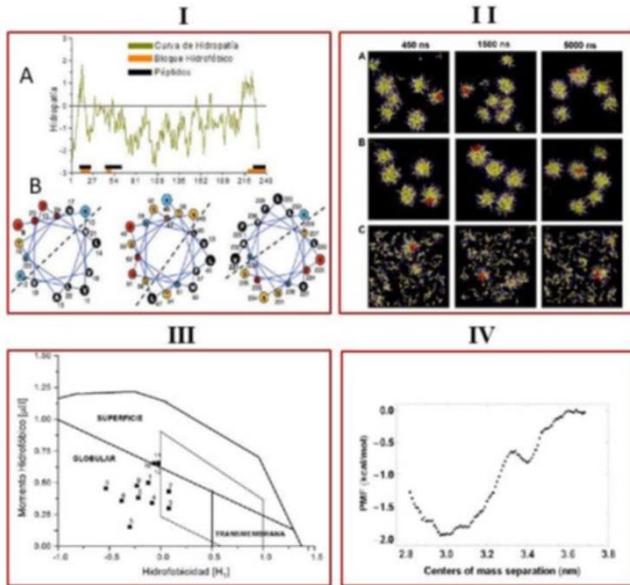




**Dra. Paola Mendoza Espinosa**  
ITESM Monterrey  
The Institute for the Obesity Research

**Título:** Estudios in silico de proteínas con importancia en la salud pública

**Resumen.** Tradicionalmente la mecánica estadística era aplicada a sistemas no-vivos como: gases, líquidos y sólidos, pero se ha extendido tanto su uso que actualmente se aplica a lo que hoy llamamos materia blanda, la cual incluye coloides, membranas y biomoléculas. La aplicación de las teorías clásicas de la física a sistemas biológicos ha construido un campo de estudio sólido y multidisciplinario, por ejemplo, las proteínas se pueden modelar como una cuerda elástica y estudiar sus propiedades reológicas, o bien por cadenas de partículas esféricas que interactúan a través de resortes y de esta forma estudiar sus propiedades dinámicas. Ambos ejemplos modelan propiedades físicas distintas, pero en conjunto presentan un análisis amplio del comportamiento biológico del sistema. Las proteínas, al igual que otras moléculas biológicas poseen información contenida en su estructura y su dinámica. La secuencia de aminoácidos en las proteínas determina un nivel de arreglo estructural conocido como estructura secundaria, de los que hay tres tipos principalmente: hélice-alfa, hojas-beta y desordenada. A su vez, determina su arreglo tridimensional y su topología membranar: número y orientación de segmentos proteicos en la membrana. También se ha observado que los lípidos ejercen sobre las proteínas efectos muy importantes en su estructura-función. Es la estructura hélice-alfa, a la que se adjudican la mayoría de las propiedades funcionales y estructurales de las proteínas en medio acuoso o en membranas. Las proteínas de las que hablaré en esta charla están asociadas a enfermedades neurodegenerativas, aterosclerosis, a la infección por el virus del VIH-1 y otras proteínas que pueden funcionar como blancos drogables con moléculas que potencialmente podrían regular desórdenes metabólicos. Con estos sistemas realicé dinámica molecular, de las cuales algunas fueron solo para observar la fenomenología y en otras se realizaron cálculos de la energética del sistema, en la figura 1 se muestran algunos resultados de estos estudios.



**IA)** Perfil de hidrofobicidad (línea verde), grupo de aminoácidos hidrofóbicos (cuadros naranjas), secuencia de los péptidos (cuadro negro) [1].

**I B)** Representación de giro helicoidal de tres péptidos con característica anfipática. Cada círculo es un aminoácido y el color indica su naturaleza: ● hidrofóbico, ● básico, ● ácido, ● polar sin carga [1].

**II)** Simulaciones en grano grueso de dinámica molecular de un péptido anfipático (rojo) en presencia de lípidos (amarillo): **IIA**) LPC, **IIB**) PPC, **IIIC**) HPC [2].

**III)** Análisis teórico de la topología membranal de hélices-alfa basados en hidrofobicidad (HT) y momento hidrofóbico ( $\mu_H$ ) [3].

**IV)** Potencial de fuerza media asociado a la interacción de dos proteínas involucradas en la formación de la cápside del VIH-1 [4].

1.- P. Brocos, **Paola Mendoza-Espinosa**, R. Castillo, J. Mas-Oliva, A. Piñeiro. Multiscale molecular dynamics simulations of micelles: Coarse grain for self-assembly and atomic resolution for finer details, *Soft Mater.* 2012, 8:9005-9014.

<https://doi.org/10.1039/C2SM25877C>

2.- J. Campos-Terán, **P. Mendoza-Espinosa**, R. Castillo and J. Mas-Oliva. Conformational and disorder to order transitions in proteins: Structure/function correlation in apolipoproteins. (2012) In *Protein Interaction/Book 2*, In Tech – Open Acces Publisher.

<https://doi.org/10.5772/37217>

3.- **P. Mendoza-Espinosa**. Tesis Doctoral: Relación Estructura/Función de Apolipoproteínas Plasmáticas. UNAM 2014.

4.- C. Lin, **P. Mendoza-Espinosa**, I. Rouzina, O. Guzmán, J. A. Moreno-Razo, J. S. Francisco, R. Bruinsma. Specific inter-domain interactions stabilize a compact HIV-1 Gag conformation. *PLoS One.* 2019 Aug 22;14(8): e0221256. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0221256>