

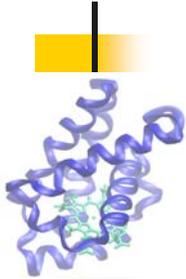
SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE HEMOPROTEÍNAS

Karina Damonte (EEM N° 16, Merlo)

Agustina Petruccelli (Liceo 1)

Profesor: Lic. Leonardo Boechi

UBA – Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – DOIAYQF / INQUIMAE
Experiencias Didácticas 2007



Nuestro objetivo fue analizar la estructura de una hemoproteína, que se encuentra en una Cyanobacteria (organismos unicelulares fotosintéticos), llamada *Synechocystis*. Para esto, tomamos como punto de partida la estructura resuelta de la proteína, y las conclusiones de los investigadores que la realizaron. Mediante simulación computacional, experimentamos con bases teóricas físico-químicas, y comparamos nuestros resultados con las conclusiones anteriormente mencionadas.

A partir de la proteína estabilizada, en primer lugar, se calculó el movimiento promedio de cada uno de sus residuos y se comparó este resultado con los resultados obtenidos por los investigadores que resolvieron la estructura de la proteína (Figuras 1 a 4).

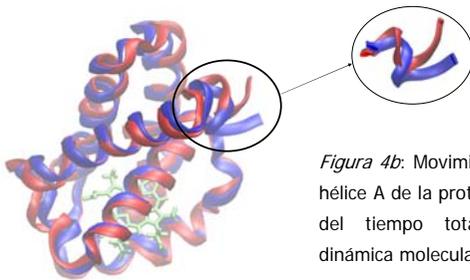


Figura 4b: Movimiento de la hélice A de la proteína luego del tiempo total de la dinámica molecular.

Figura 4a: Comparación entre la proteína original (Azul) y la obtenida luego de 2937 ps de dinámica molecular (Rojo). Grupo "hemo" (Verde).

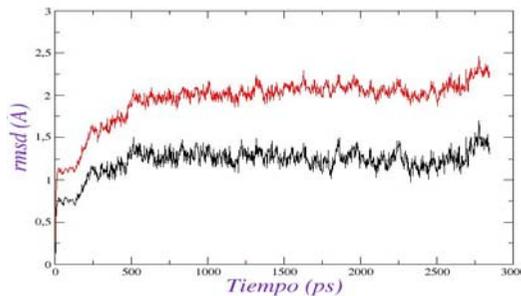


Figura 1: rmsd en función del tiempo total de la dinámica molecular (2937 ps). En rojo se tuvieron en cuenta la cadena lateral de los residuos y la cadena principal, en negro solo la cadena principal.

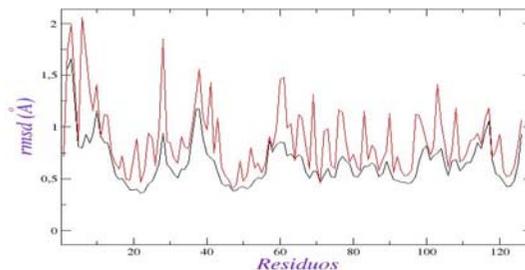


Figura 2: rmsd en función de los residuos de la proteína estabilizada, durante 2280 ps. En rojo se tuvieron en cuenta la cadena lateral de los residuos y la cadena principal, en negro solo la cadena principal.

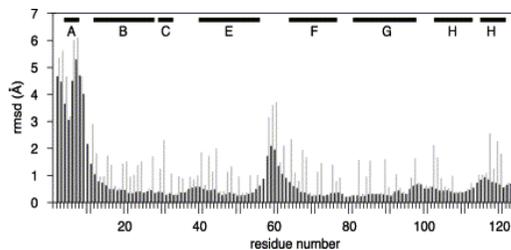


Figura 3: rmsd en función de los residuos de la proteína obtenida por los investigadores que resolvieron la estructura de la misma. En gris se tuvieron en cuenta la cadena lateral de los residuos y la cadena principal, en negro se graficó solo la cadena principal.

- Hemos encontrado, al igual que el grupo de investigadores, que la hélice A desarrolló un mayor movimiento que el otro extremo de la proteína: la hélice H.
- Respecto a la variación de los loops, nuestros resultados reafirman que el loop EF de la proteína tiene una variación notable, pero en comparación con el resto de la proteína, su movimiento no parece ser tan importante.
- Por otro lado hemos observado que, según nuestros resultados, la cadena polipeptídica presenta un mayor movimiento en el loop CD lo cual difiere de las conclusiones obtenidas por los investigadores.