

# Simulación Computacional de Hemoproteínas.

Cecilia A. Ritacco, Christian E Lencina, Herman Schinca, Leonardo Boechi  
Lab Modelado Molecular DQIAyQF, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA

## INTRODUCCIÓN

Realizar una simulación consiste en utilizar un modelo mediante el cual se intenta realizar una representación de la realidad para responder preguntas planteadas. El modelo utilizado es fidedigno porque ha sido testeado en otras proteínas obteniendo resultados similares a los obtenidos en laboratorio. La simulación computacional puede ayudar a disminuir el rango de fracasos a la hora de experimentar, dado que el costo de realizar una simulación es mucho menor a realizar un experimento propiamente dicho.

Un tipo de simulación muy útil al trabajar con las proteínas es la dinámica molecular clásica. En la misma se representa la proteína como un sistema mecánico en el cual las partículas que lo componen interactúan entre sí a través de potenciales analíticos sencillos.

En nuestro caso trabajamos con un tipo de Hemoglobina llamada Hemoglobina Truncada encontrada en una cyanobacteria *Synechocystis*. Esta hemoglobina tiene una cadena polipeptídica de 123 aminoácidos, cuenta con un grupo Hemo al igual que otras hemoglobinas, pero tan solo es una cuarta parte de ellas.

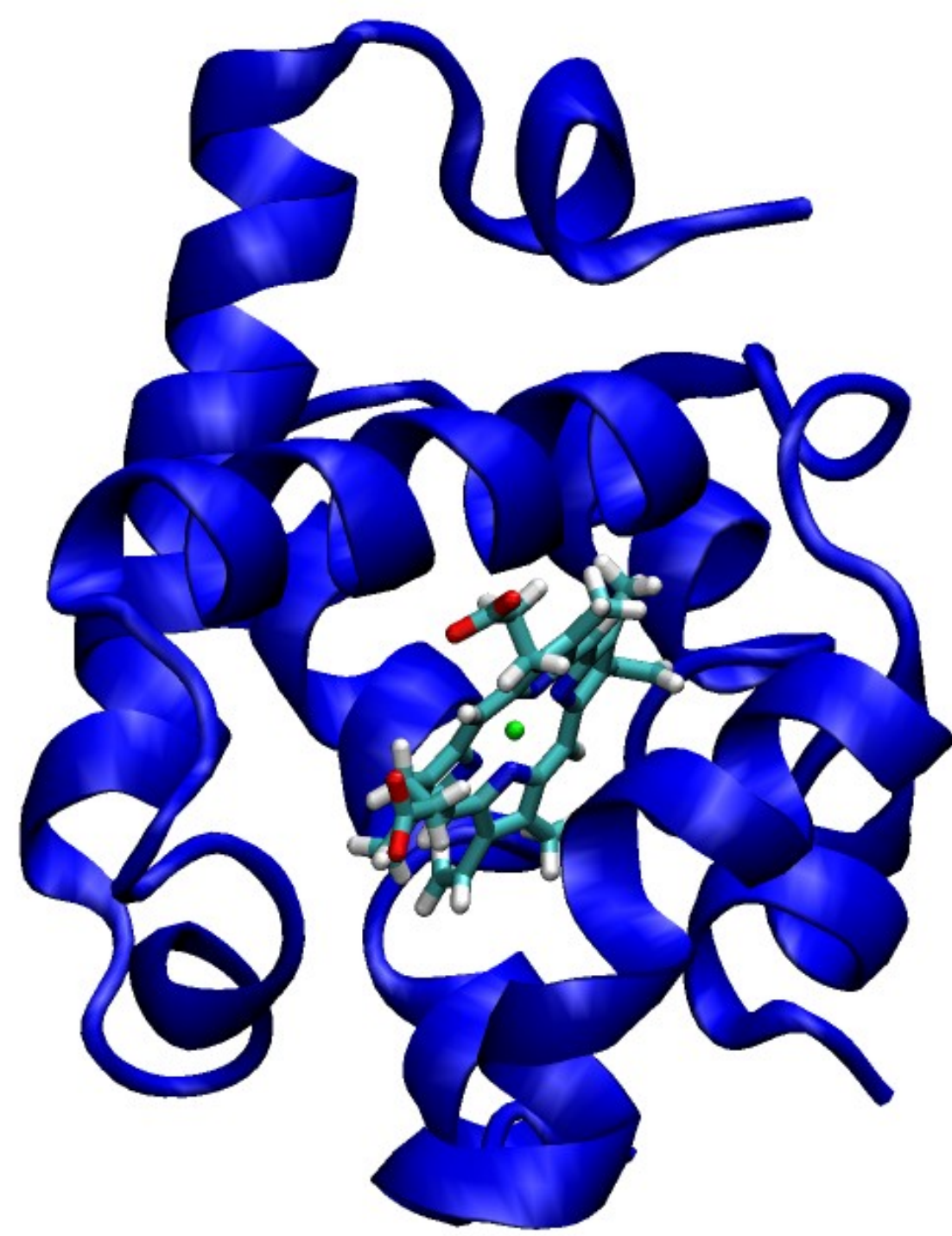


Fig. 1 Hemoglobina Truncada de cyanobacteria *Synechocystis*

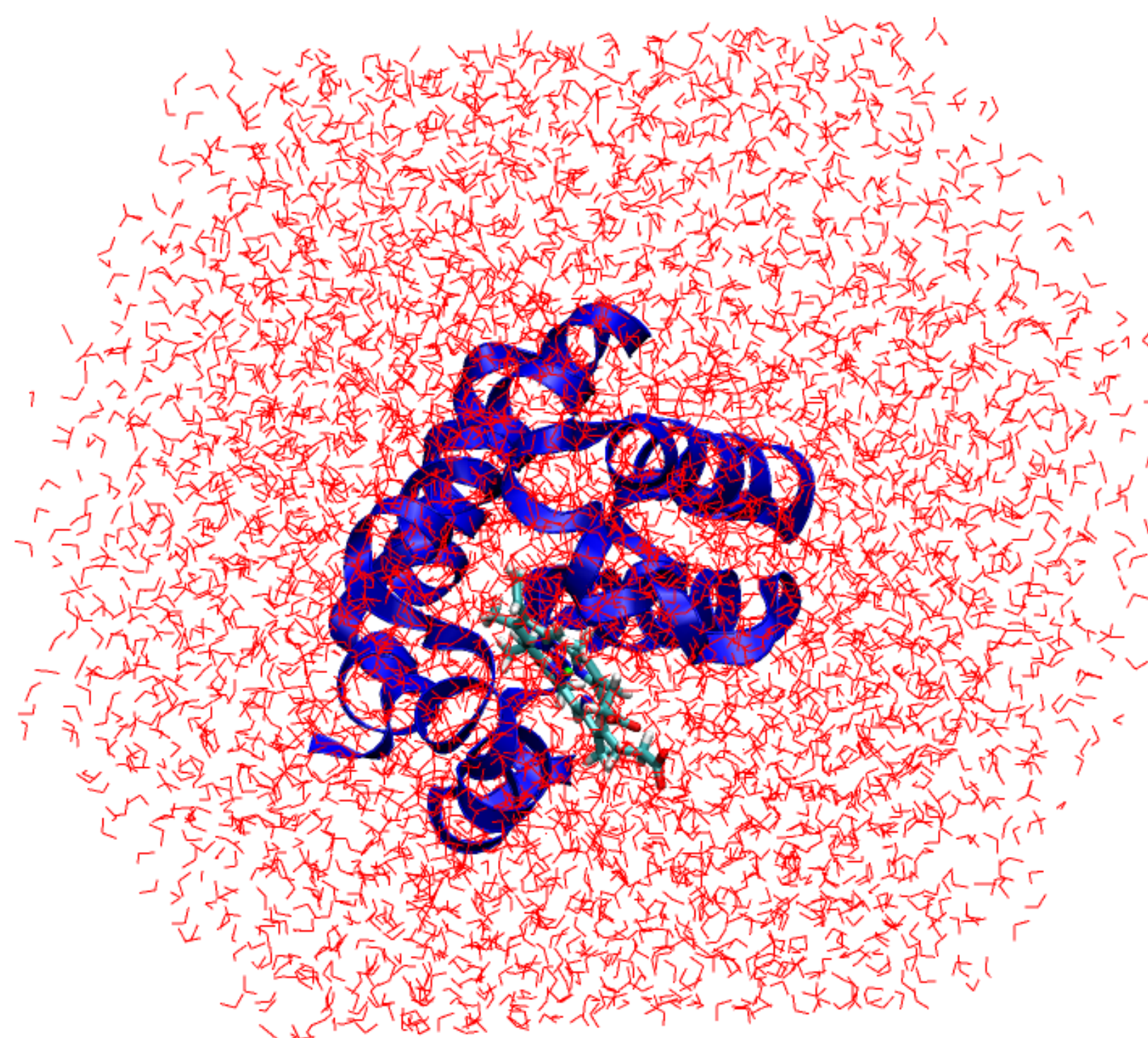


Fig. 2 Hemoglobina Truncada de cyanobacteria *Synechocystis*. Pueden observarse las moléculas de agua que rodean a la proteína.

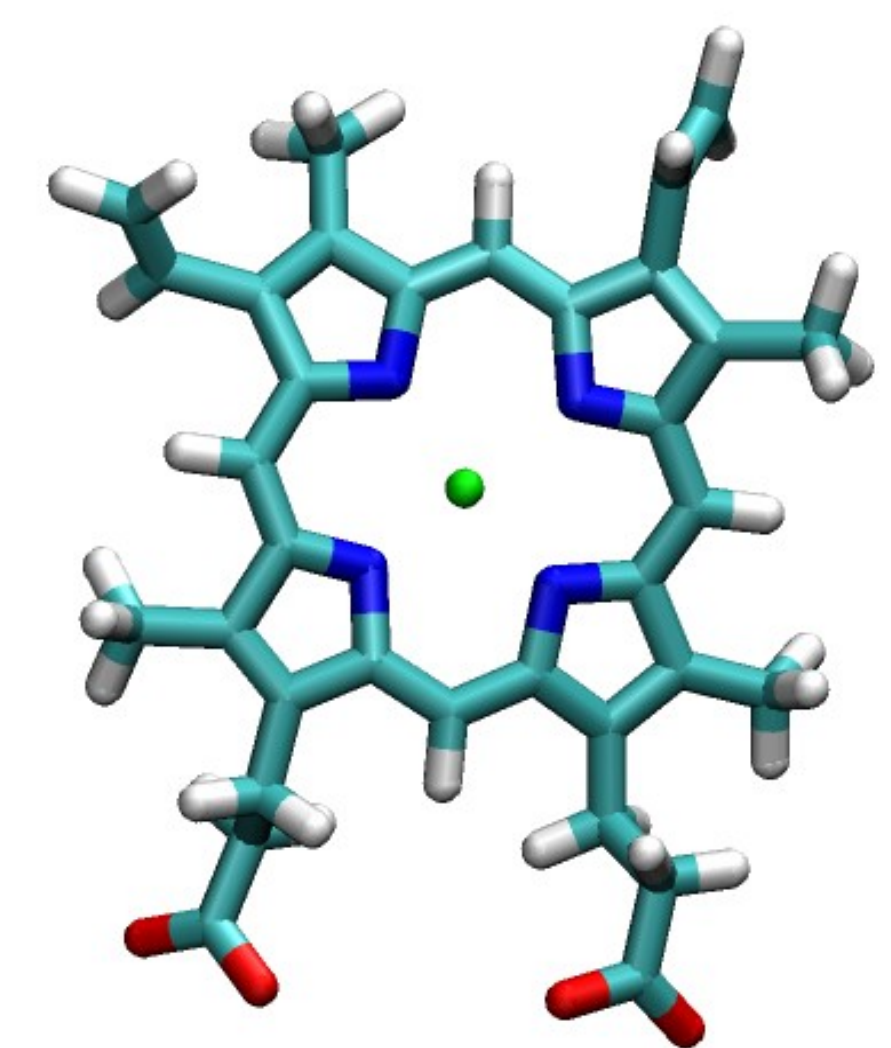


Fig. 3 Grupo 'emo' presente en la Hemoglobina.

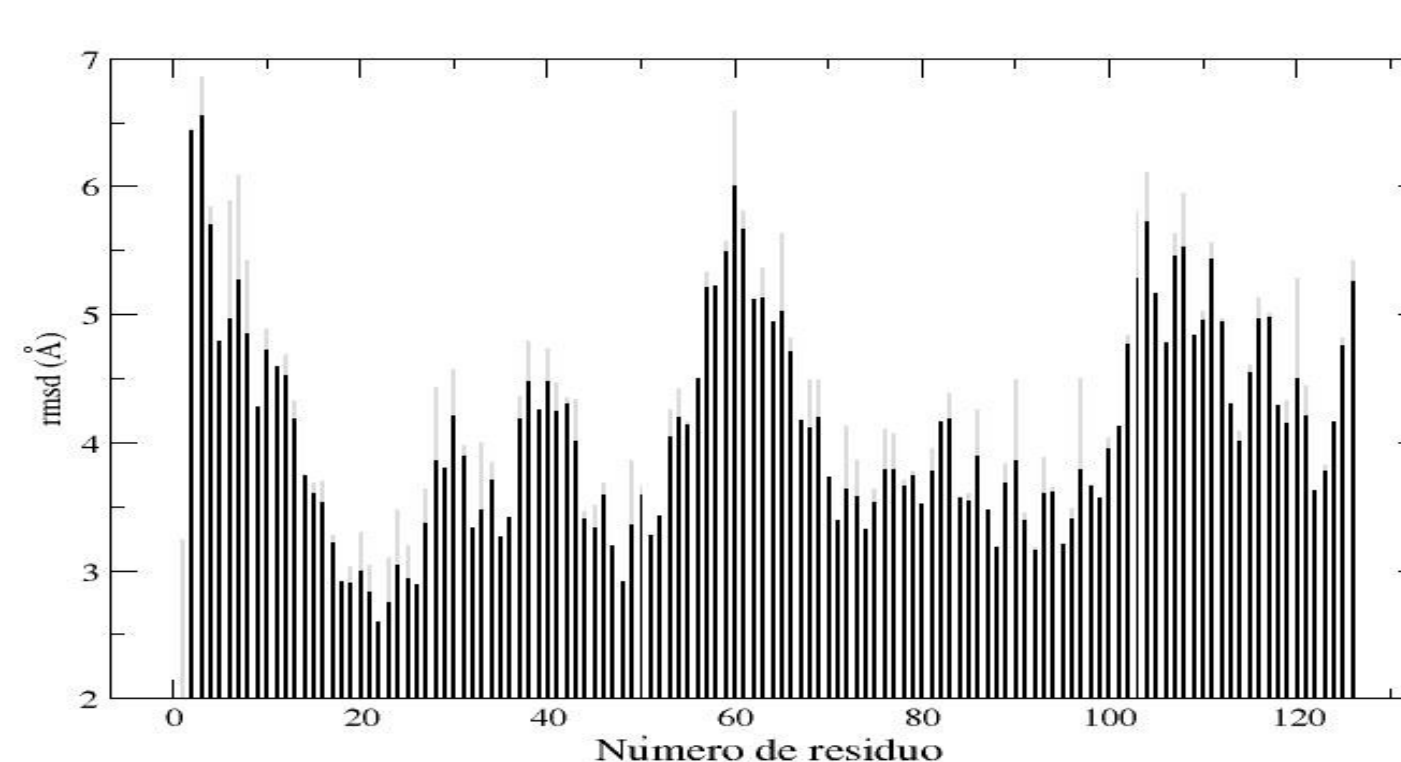
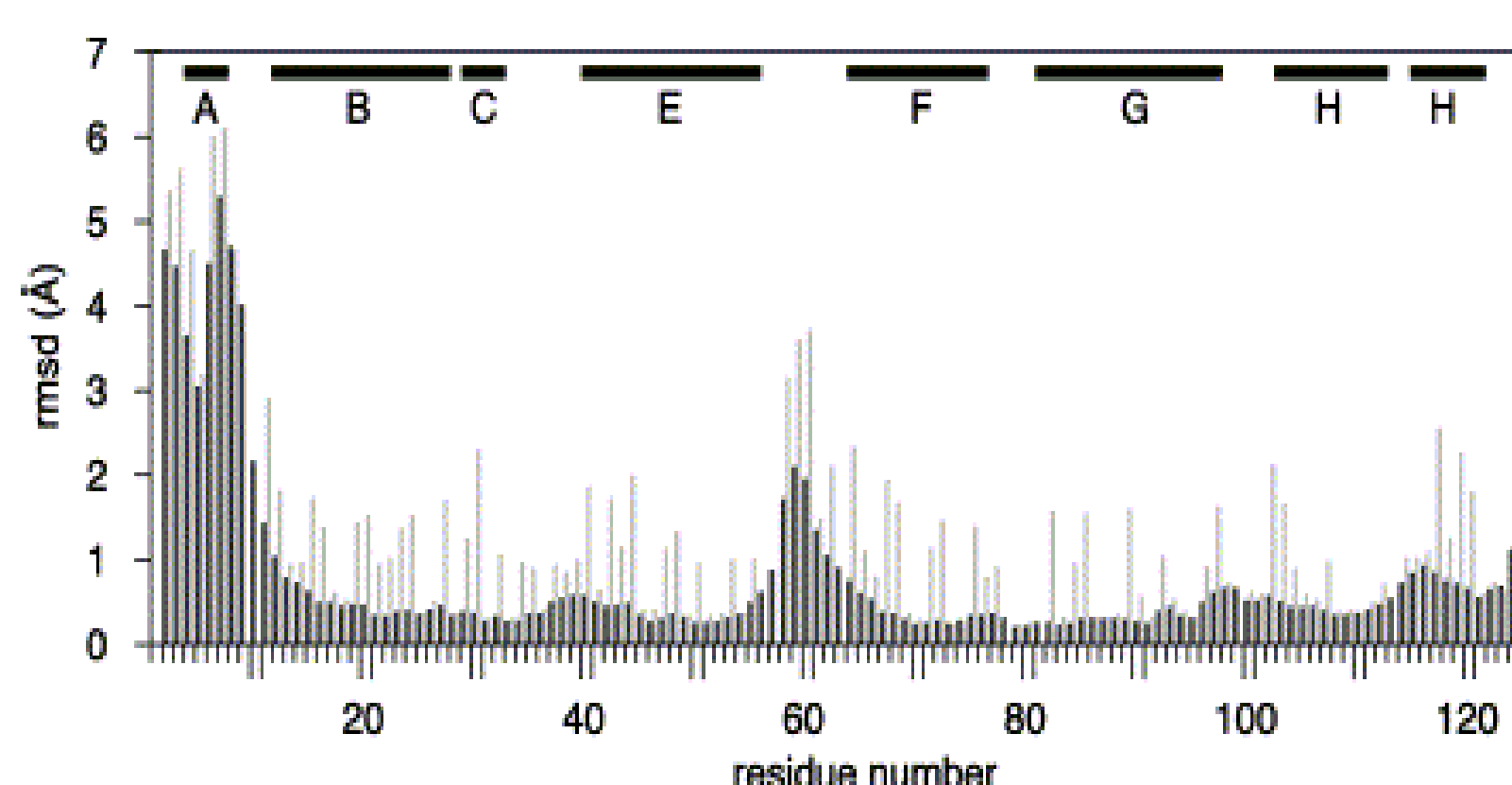


Fig. 4 A la izquierda los resultados experimentales y a la derecha resultados obtenidos computacionalmente.

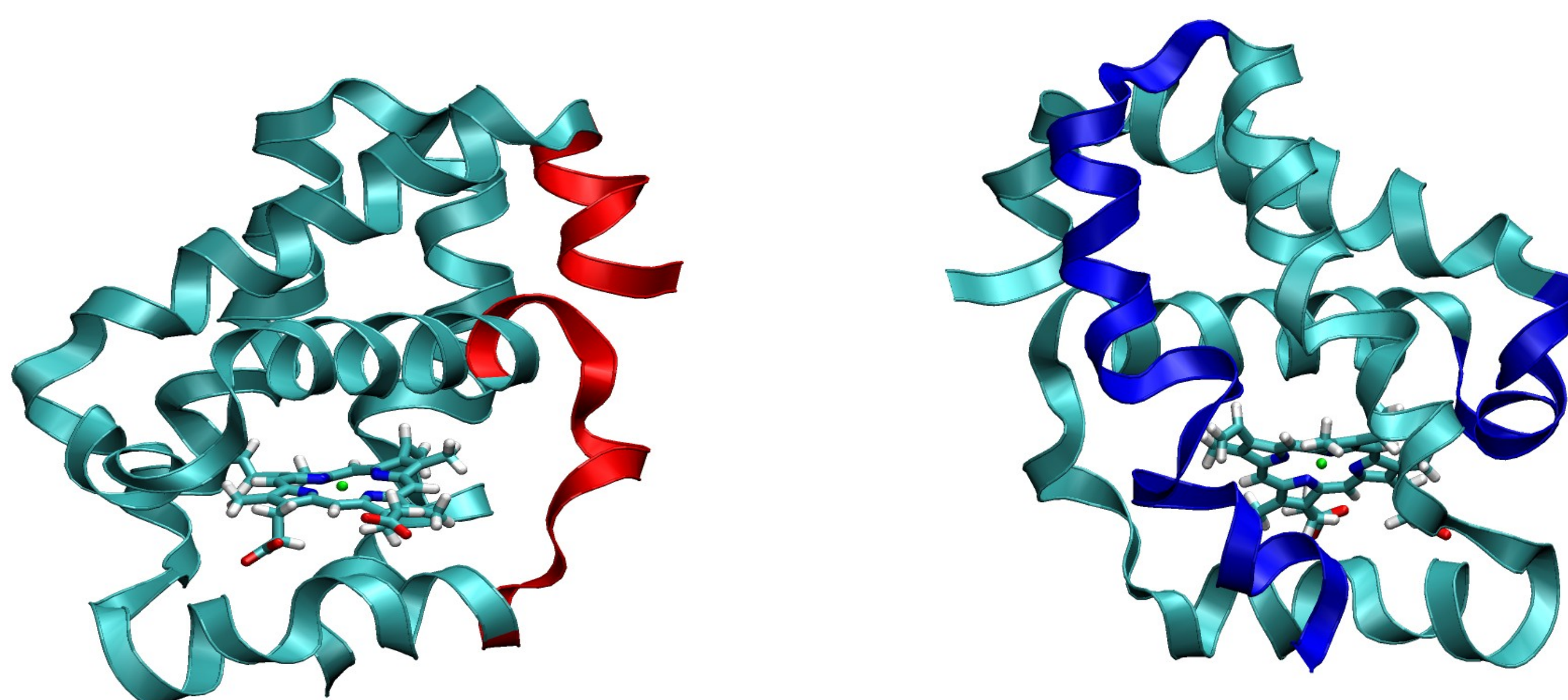


Fig. 5 En rojo y en azul se observa zonas de mayor movimiento.

## CONCLUSIÓN

Como podemos observar, se mantiene cierta similitud entre ambos gráficos. En particular en la primera porción de la proteína, donde se observa gran movilidad en los dos gráficos. Consideramos que es razonable que se visualicen este pico, ya que el mismo está en contacto con el agua que rodea a la proteína. Por otro lado, encontramos similitud en el rango de 55-65 aminoácidos que podría deberse a la forma del plegamiento que toma la proteína y que en este caso es un Loop. En los rangos donde no se presenta tanto movimiento, también lo podríamos asociar a la forma que toma la proteína, en estos casos mucho más estructurada, llamada Hélice. Sin embargo, notamos en general mayor movilidad en nuestro gráfico, sobre todo en el rango de residuos 100-123 y 30-40. El primer rango pertenece al otro extremo de la proteína, por lo tanto creemos que es aceptable nuestro resultado por deberse también a la zona del extremo en contacto con el agua. Por otro lado, en el rango 30-40 se encuentra una zona donde se unen dos Hélices mediante un Loop característico, que en general en estas proteínas presenta mucha movilidad. Alrededor del aminoácido 80, existe un Loop que no presenta la movilidad habitual. Probablemente el mismo posea cierta estructura definida que le impide un mayor movimiento.