

# BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA



INSTITUTO DE FÍSICA  
“Luis Rivera Terrazas”



## SEMINARIO “DR. JESUS REYES CORONA”

**“Propiedades termodinámicas de equilibrio de cadenas homo y heteropoliméricas proteinogénicas ideales mediante modelos coarse-grained en Mecánica Estadística”**

**Dr. Luis Olivares Quiroz  
Academia de Física & Posgrado en Ciencias de la Complejidad,  
Universidad Autónoma de la Ciudad de México-Cuauhtec**

El estudio de las propiedades termodinámicas de equilibrio de cadenas homo y heteropoliméricas proteinogénicas se ha convertido en uno de los temas más activos en la interfase entre Física y Biología Molecular. Una de las razones para este interés yace en el paradigma estructura-función el cual establece que, para una clase amplia de macromoléculas biológicas como proteínas y péptidos, el estado nativo es también aquel que exhibe la mayor actividad biológica. El hecho que el estado nativo de una proteína corresponda en general a la conformación de mínima energía libre  $F$  en el Paisaje Energético de la misma, convierte al estudio cuantitativo de estos sistemas en una arena ideal para la aplicación de herramientas estándares de Física Estadística, Mecánica Clásica y aún de la Mecánica Cuántica, como sucede en el caso del efecto de tunelaje cuántico observado en la actividad catalítica de algunas enzimas. En esta charla se abordará una metodología basada en la Mecánica Estadística de equilibrio para el cálculo de la función de partición de cadenas homo y heteropoliméricas ideales proteinogénicas utilizando como punto de partida modelos generales en el espacio de conformaciones que admiten la existencia de soluciones analíticas completas. Estos modelos son conocidos en la literatura como modelos de grano-grueso (coarse-grained models) dado que a fin de obtener soluciones analíticas para la función de partición de equilibrio simplifican la representación de una cadena polipeptídica ideal. En esta exposición se discutirán los detalles técnicos de dos modelos específicos dentro de esta categoría, el llamado Modelo de Zwanzig y el modelo de red elástica (Elastic Network Model), así como los resultados y limitaciones que de ellos se pueden derivar. Discutiremos las características de la representación de cadenas homopoliméricas ideales, los resultados obtenidos hasta el momento en esta dirección y su generalización inmediata al caso de cadenas heteropoliméricas.

**Auditorio-IFUAP  
Viernes 22 de Agosto de 2014  
13:00 Hrs.**