

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA INSTITUTO DE FÍSICA

“Ing. Luis Rivera Terrazas”



SEMINARIO SEMANAL
“Jesús Reyes Corona”



“*Nuevos modelos de agua flexibles para el estudio de proteínas de membrana tipo helicoidal*”

Dr. Jorge Alberto Aguilar Pineda

Investigador Posdoctoral en el Instituto de Física “Ing. Luis Rivera Terrazas”, BUAP

Resumen

El agua es un componente esencial para la vida. Dentro de nuestro cuerpo, cumple diversas funciones entre las que destacan la estructura, estabilidad, dinámica y función de las macromoléculas biológicas. Sin embargo, el ambiente electrostático que rodea a las proteínas de membrana difiere al del agua en bulto, afectando sus propiedades estructurales e interacciones con otros componentes bioquímicos. Evidencia experimental y teórica ha mostrado que la constante dieléctrica en la vecindad de las membranas celulares oscila entre valores de 4 a 20. En un estudio reciente, usando simulaciones de dinámica molecular y diferentes técnicas *in silico*, mostramos cómo varios modelos de agua no son capaces de reproducir propiedades estructurales en el receptor GPR40, una proteína transmembranal involucrada en la diabetes mellitus. En esta plática abordaremos algunas de las dificultades para modelar sistemas de membrana y cómo una propuesta para mejorar estas propiedades es utilizar modelos de agua que reproducen ambientes de baja electrostática

Auditorio del Instituto
Viernes 13 de septiembre de 2024
13:00 hrs