

ESTUDIO DE SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE ADSORCION DE PROTEINAS: LISOZIMA SOBRE SUBSTRATOS CARGADOS

M. Claudina Franchetti^{a,b}, Mercedes Campderros^c, Paulo M. Centres^b, M. Pilar Ferraris^c, Claudio Narambuena^{a,b}

^aGrupo de Nanobiotecnología y Sistemas complejos. Facultad Regional San Rafael. Universidad Tecnológica Nacional. UTN-FRSR-CONICET.

^bInstituto de Física Aplicada., CONICET, Universidad Nacional de San Lu s, Argentina.

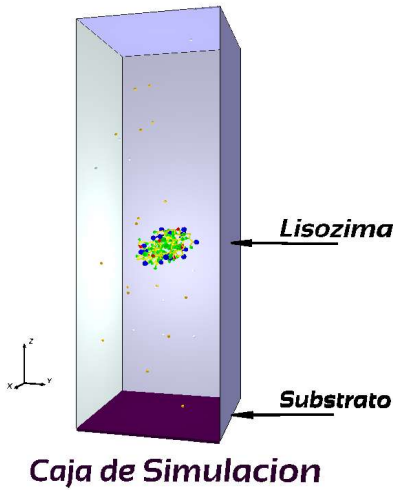
^cInstituto de Investigaciones en Tecnología Qu mica (INTEQUI). Universidad Nacional de San Lu s-CONICET, Argentina.

Introducci n

Resultados

- Lisozima (LIS) es una enzima bacteriol tica que cataliza la hidr lisis de las uniones. Lisozima es abundante en numerosas secreciones como l grimas y otros fluidos biol gicos. La fuente principal de esta prote na es el alb men de huevo de donde se extrae para su uso industrial, en particular para el control de las bacterias l cticas en alimentos. Lisozima es una enzima de amplio uso en la industria farmac utica y alimenticia. El objetivo de este trabajo es la purificaci n de manera eficiente y econ mica.
- En este trabajo estudiamos mediante simulaci n de Monte Carlo la variaci n entre la Carga Z, el pH y la Sal.

Figura 1. Modelo de Simulaci n



Modelo de Grano Grueso

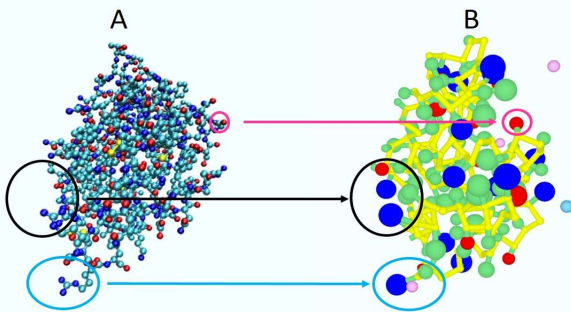


Fig 2. Modelo  tomo por  tomo obtenido del PDB(Protein Data Bank)

Fig 3. Prote na en el Modelo de Grano Grueso

Ecuaciones utilizadas en el modelo: 1-2-3-5) Energ a potencial, (4) Carga electrost tica de la part cula

$$(1) \frac{U}{k_B T} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N \frac{U_{ij}(r_{ij})}{k_B T} + \sum_{i=1}^N \frac{U_{is}(r_i^z)}{k_B T}$$

$$(2) \frac{U_{ij}(r_{ij})}{k_B T} = l_B \frac{z_1 z_2}{r_{ij}}, r_{ij} > \frac{d_i + d_j}{2} \quad (4) l_B = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r k_B T}$$

$$(3) \frac{U_{ij}(r_{ij})}{k_B T} = \infty, r_{ij} > \frac{d_i + d_j}{2} \quad (5) \frac{U_{is}(r_i^z)}{k_B T} = -2\pi l_B \sigma_S z_i r_i^z$$

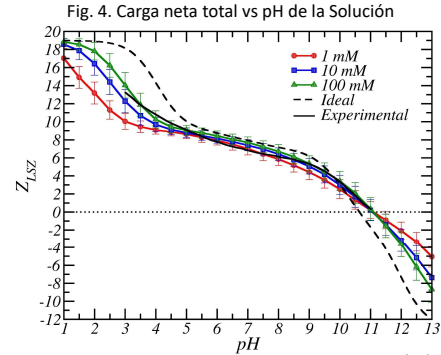


Fig. 4. Carga neta total vs pH de la Soluci n

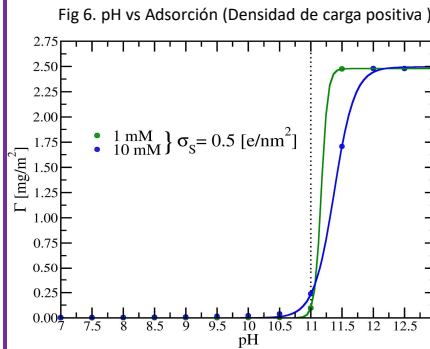


Fig 6. pH vs Adsorci n (Densidad de carga positiva)

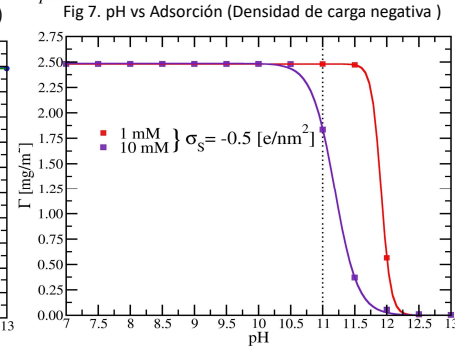


Fig 7. pH vs Adsorci n (Densidad de carga negativa)

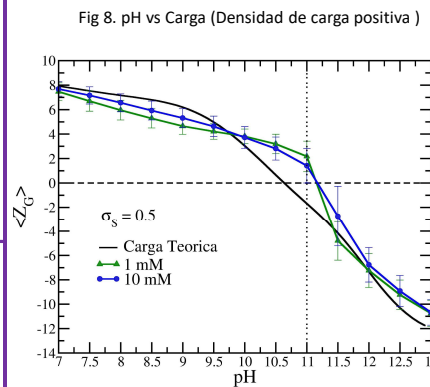


Fig 8. pH vs Carga (Densidad de carga positiva)

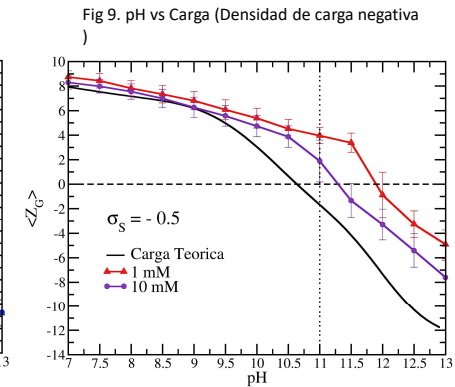


Fig 9. pH vs Carga (Densidad de carga negativa)

Conclusiones

- La prote na tiene un punto isoel ctrico (pI=11), el cual concuerda con el valor experimental.
- La interacci n de LIS con un sustrato cargado positivamente muestra que siempre se adsorbe a valores de pH mayores que el punto Isoel ctrico y esta adsorci n es debilitada al aumentar la concentraci n de sal.
- En presencia de un sustrato cargado negativamente observamos que la prote na en un primer momento no se adsorbe al llegar al punto Isoel ctrico. Pero al llegar a pH = 12 observamos que comienza a adsorberse. Esto sucede debido a que el sustrato modifica la carga neta de la prote na mediante un mecanismo de regulaci n de carga.

Referencias

- C.F.Narambuena. Colloids and Surfaces B: Biointerfaces 174,(2019) 511-520.
- Mar a del Pilar Ferraris, Guillermo I. Barrera, A. P rez Padilla, Jorge A. Rodr guez. Journal of Chromatography B, 879 (2011) 2741– 2745.
- Mar a del Pilar Ferraris*, Ulises A. Gonzalez, Carlos F. Aguilar, Jorge A. Rodr guez. Journal of Chromatography B, 1020 (2016) 129-133.
- Pasche, V ros, Griesser, Spencer and Textor. J. Phys. Chem. B 2005, 109, 17545-17552.
- F. Galisteo, W. Norde, Adsorption of lysozyme and alpha-lactalbumin on poly(styrenesulphonate) latices 1(1995)