

Morales, Andrés Hernán¹, Hero, Johan Sebastian¹, Lascano, Gonzalo Andrés¹, Martínez, María Alejandra¹, Gómez, María Inés², Romero, Cintia Mariana¹ y Ledesma, Ana Estela³

¹ PROIMI-CONICET. Av. Belgrano y Pasaje Caseros. San Miguel de Tucumán; ² UNT-FBQF. Catedra de Química Inorgánica. Ayacucho 449. San Miguel de Tucumán. ³ CIBAAL. Ruta Nacional N°9 Km 1125. Santiago del Estero. E-mail: andymorales_2006@hotmail.com

INTRODUCCIÓN

Las técnicas de inmovilización enzimática constituyen estrategias ampliamente usadas para mejorar la actividad, especificidad y estabilidad de diversas enzimas empleadas en la industria, además de facilitar su uso continuo. Una de las técnicas más simples y económicas se basa en la adsorción física de la proteína a un soporte, donde analizar el tipo de interacción que ocurre durante la unión puede resultar de mucha utilidad

para entender y predecir diferentes fenómenos. El objetivo de este trabajo consiste en evaluar mediante herramientas computacionales las posibles interacciones durante la inmovilización de una lipasa de *Candida rugosa* sobre soportes de óxidos mixtos ($\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ y MgFe_2O_4).

METODOLOGÍA DE TRABAJO

Gaussian16

ESTRUCTURAS *IN SILICO* DE ÓXIDOS

$\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$
 MgFe_2O_4

Redes ortorrómbicas y cúbicas tridimensionales + duplicación de la celda unidad a lo largo de uno de los planos cristalinos

PROTEIN DATA BANK

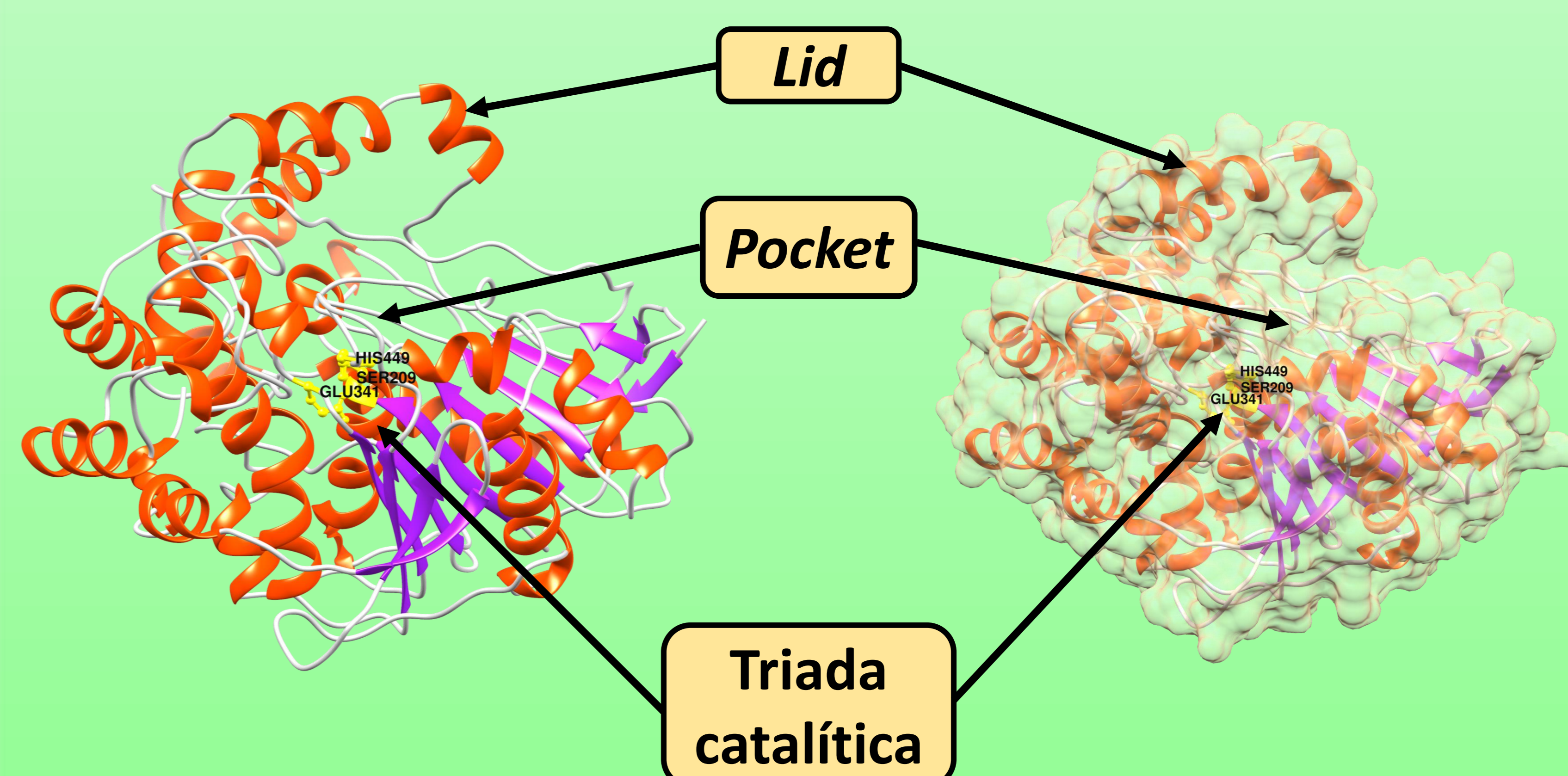
Lipasa de *Candida rugosa* – Estructura abierta

1CRL

AutoDock4.2

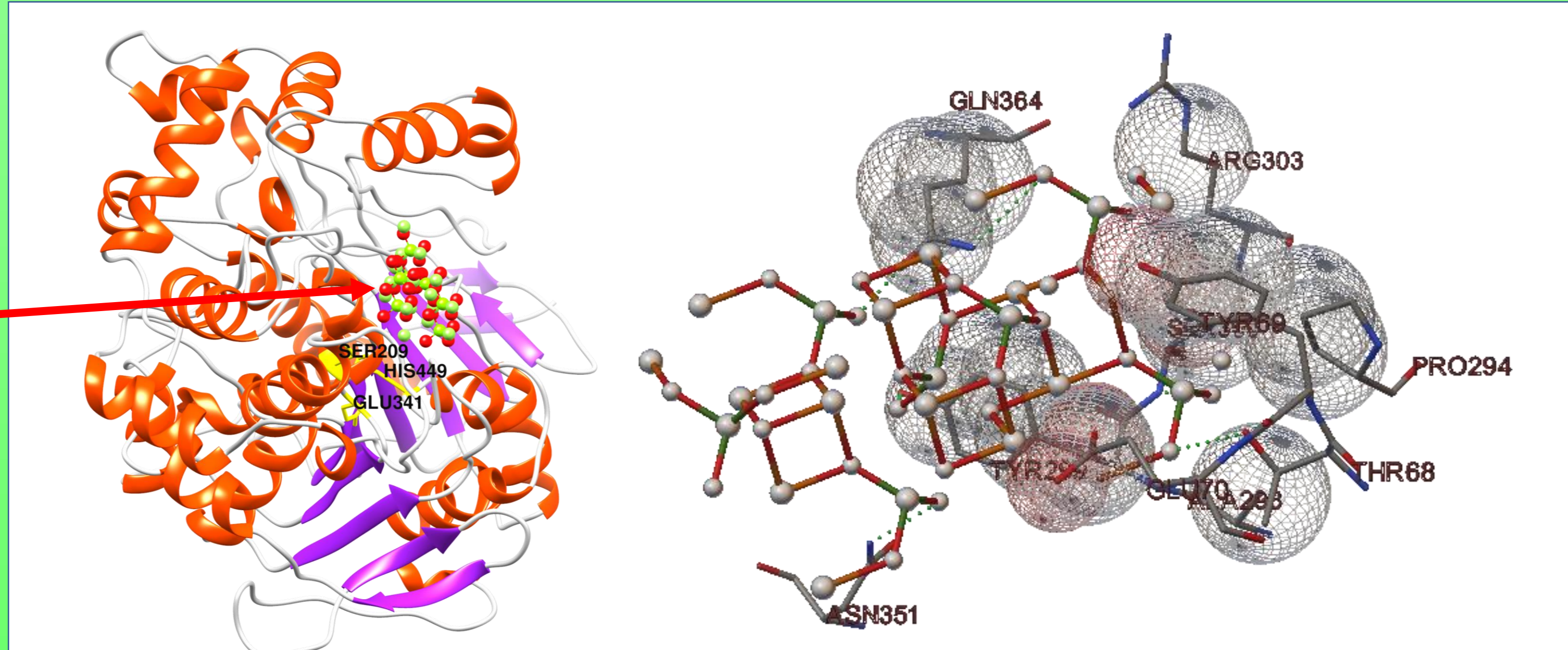
Estudios de interacción proteína-soporte

LIPASA *Candida rugosa* – Estructura abierta



INTERACCIÓN PROTEÍNA-SOPORTE

MgFe_2O_4



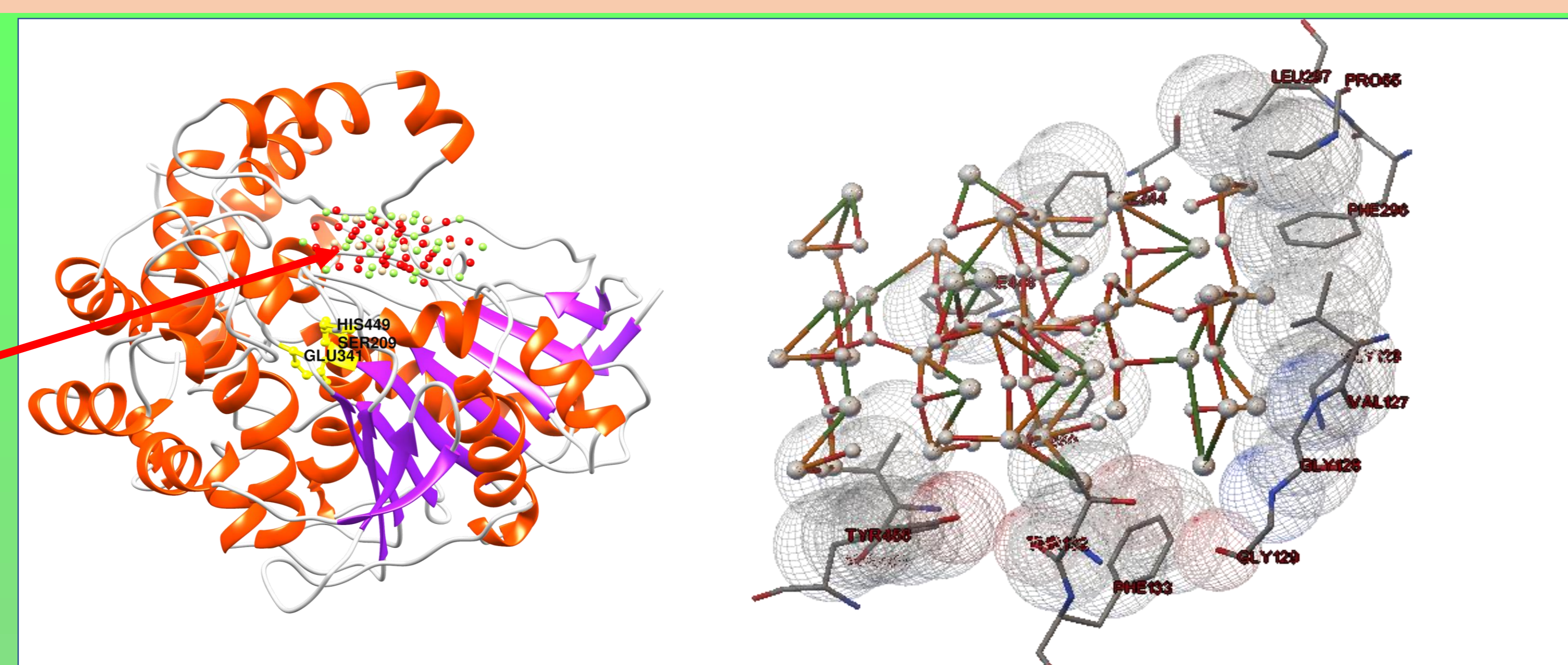
ENERGÍA DE UNIÓN (Kcal/mol)

-8,03

$K_{\text{inhibición}}$ (μM)

1,3

$\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_4$



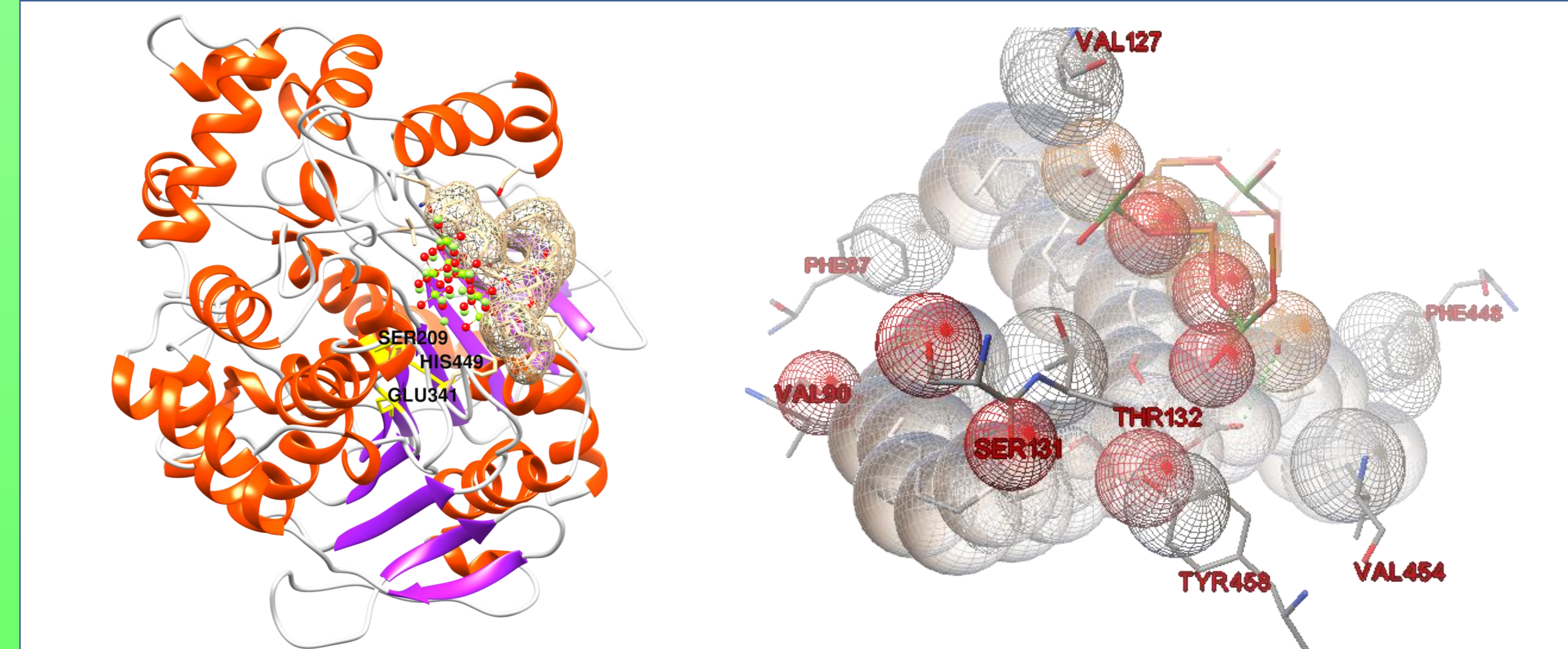
ENERGÍA DE UNIÓN (Kcal/mol)

-5,81

$K_{\text{inhibición}}$ (μM)

54,67

INTERACCIÓN BIOCATALIZADOR-SUSTRATO



-3,91

1,35

CONCLUSIONES

- La enzima se une de manera diferente a ambos óxidos, resultando más fuerte la interacción con el MgFe_2O_4 .
- La unión enzima-soportes es mediada por interacciones hidrofóbicas, observando particularmente con el $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_4$ interacciones π -anión.
- La unión de la enzima al $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ facilitaría la interacción de trioleína con la triada catalítica.
- La unión de la enzima al MgFe_2O_4 podría interrumpir la entrada del sustrato al sitio activo de la enzima.

REFERENCIAS

- Hoarau, M., *Org. Biomol. Chem*, 2017, 15, 539-551.
- Morales, AH., *Chem. Select*, 2019, 4, 1-11.