

Paula Paterlini, Ana Ledesma, Analía Álvarez, Cintia M. Romero,

E-mail: paula_paterlini@hotmail.com. PROIMI-CONICET. Av. Belgrano y Pasaje Caseros. UNT. Ayacucho 205. 4000 Tucumán, Argentina.

Introducción

Las nanopartículas (NPs) obtenidas por síntesis biogénica se caracterizan por poseer un recubrimiento de biomoléculas adsorbidas sobre la superficie, las cuales actúan como agentes estabilizadores, controlan el tamaño de la NP y le otorgan propiedades físico-químicas y biológicas únicas. Estas proteínas son conocidas como proteínas corona [1] [2].

El objetivo de este trabajo fue analizar la conformación en capas de proteínas previamente identificadas sobre la superficie de NPs de plata (AgNPs) sintetizadas por la cepa *Streptomyces* sp. M7.

Materiales y métodos

Proteínas estudiadas: TerD, superóxido dismutasa, glucosa-6-fosfato isomerasa, aminopeptidasa y el transportador ABC.

- Modelado de proteínas a partir de su secuencia utilizando SWISS-MODEL - Análisis y llenado de los aminoácidos faltantes utilizando PyMol - Generación de la estructura tridimensional - Obtención de una superficie de AgNP utilizando Gaussian 16 optimizada con el método 6-311++g** - Exploración del sitio de unión entre las proteínas y la AgNP mediante acoplamiento molecular con AutoDock 4.

Modelado con SWISS-MODEL



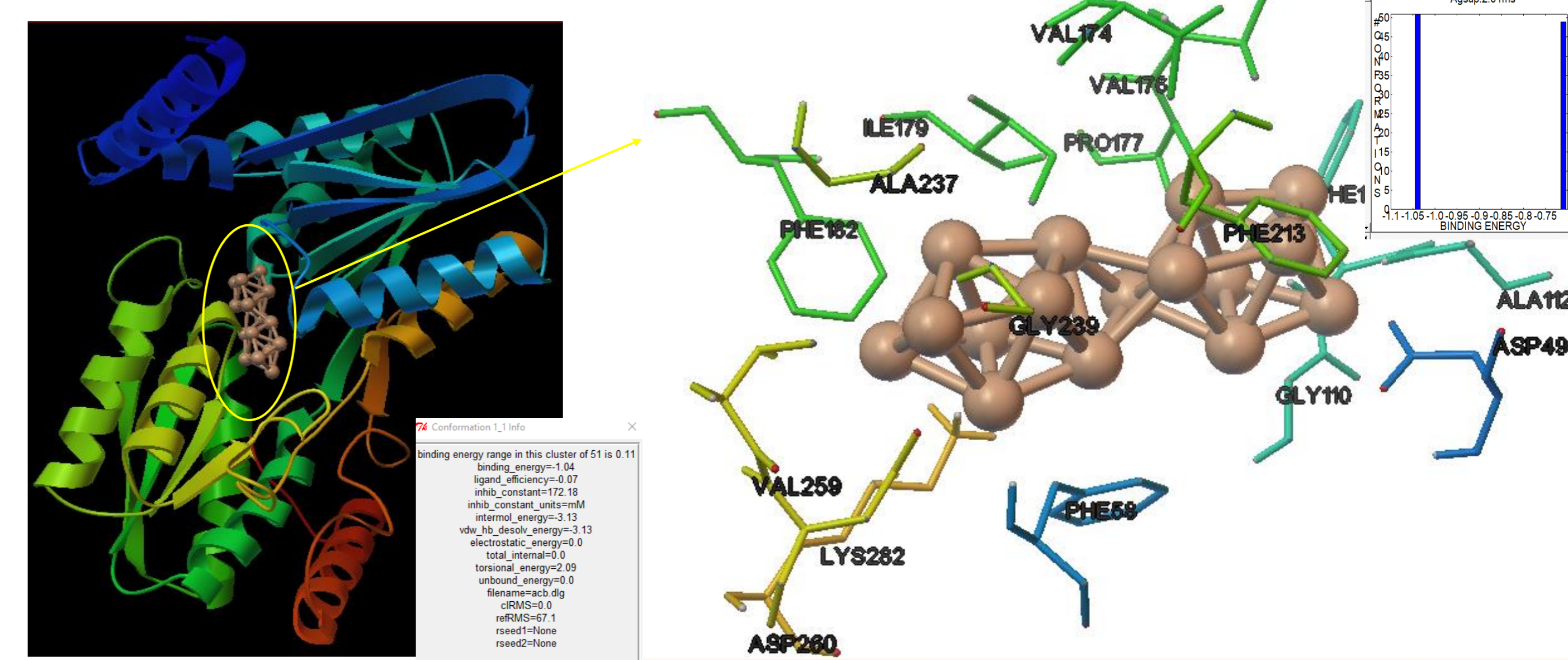
PyMol

ABC transporter

MRRSKLTSVAVGVASIALAATACGGTSSDSGS DSKGL

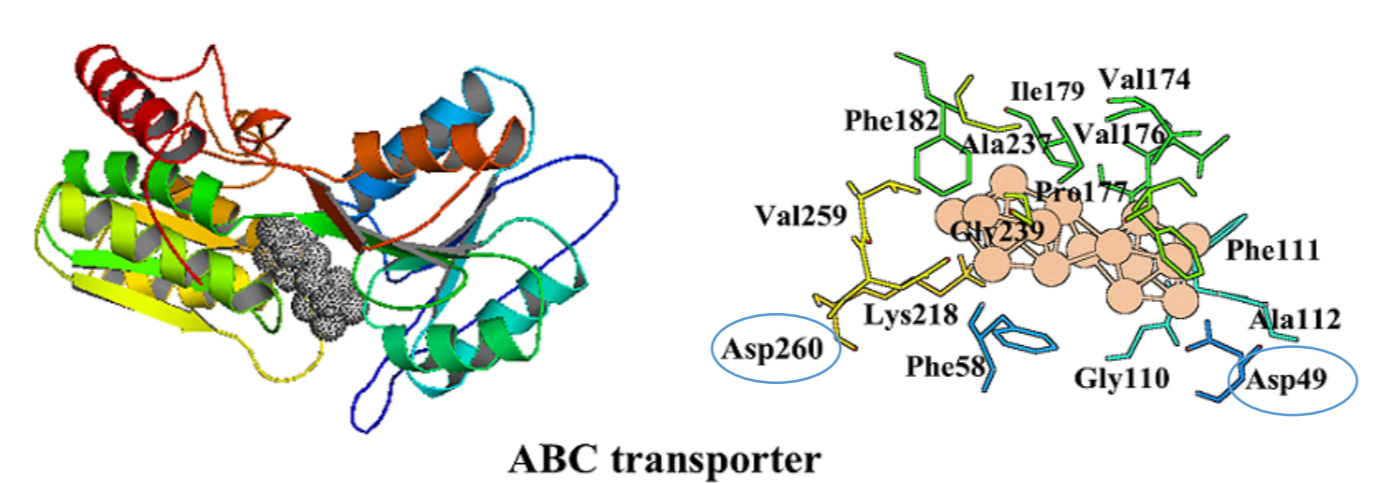
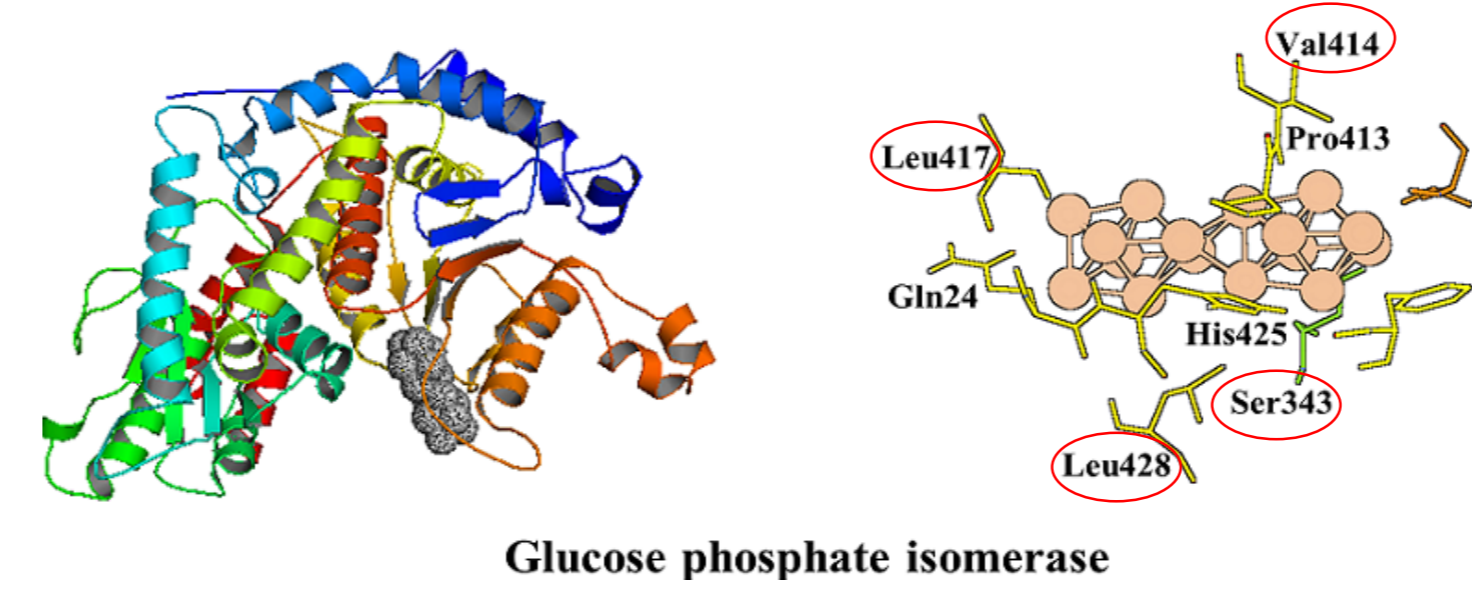
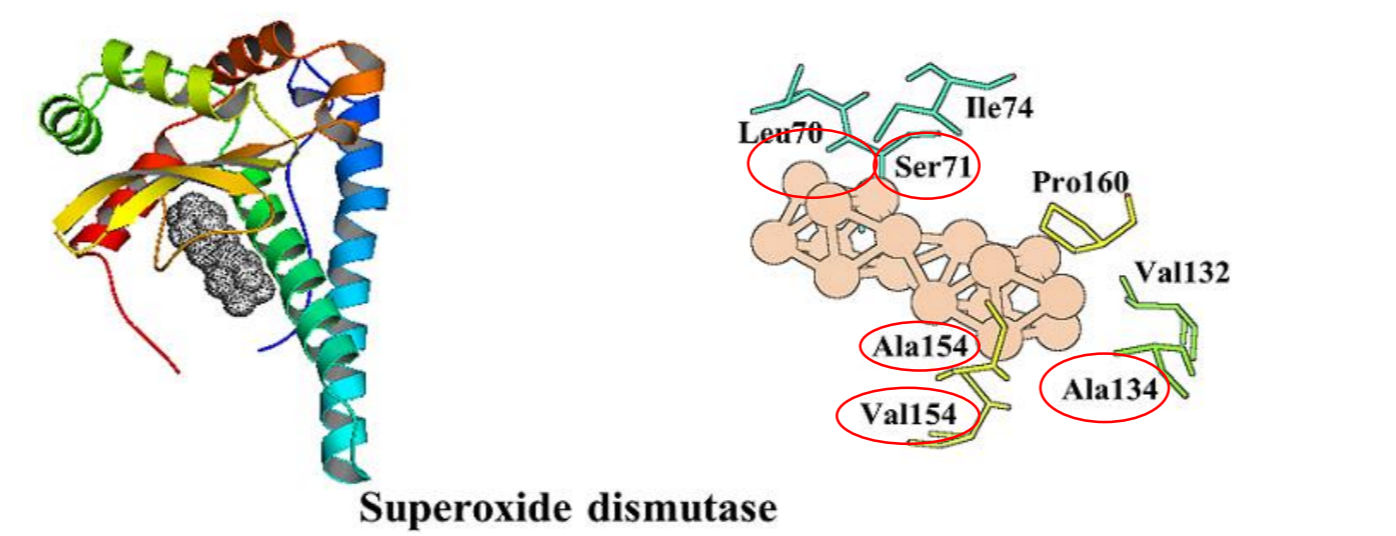
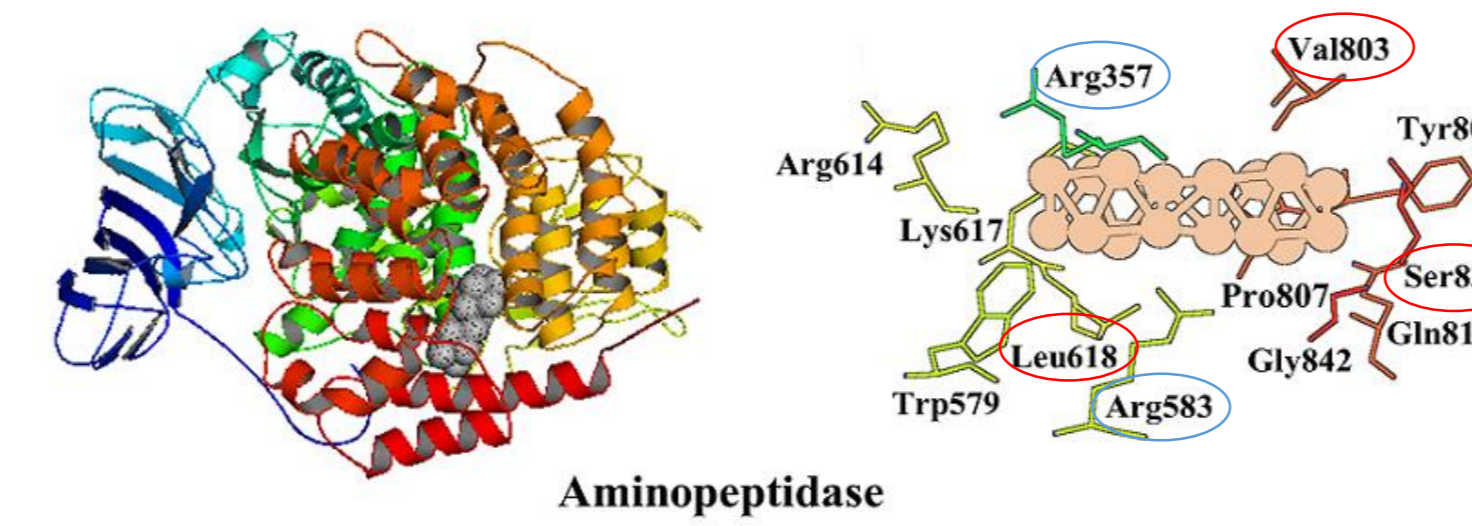
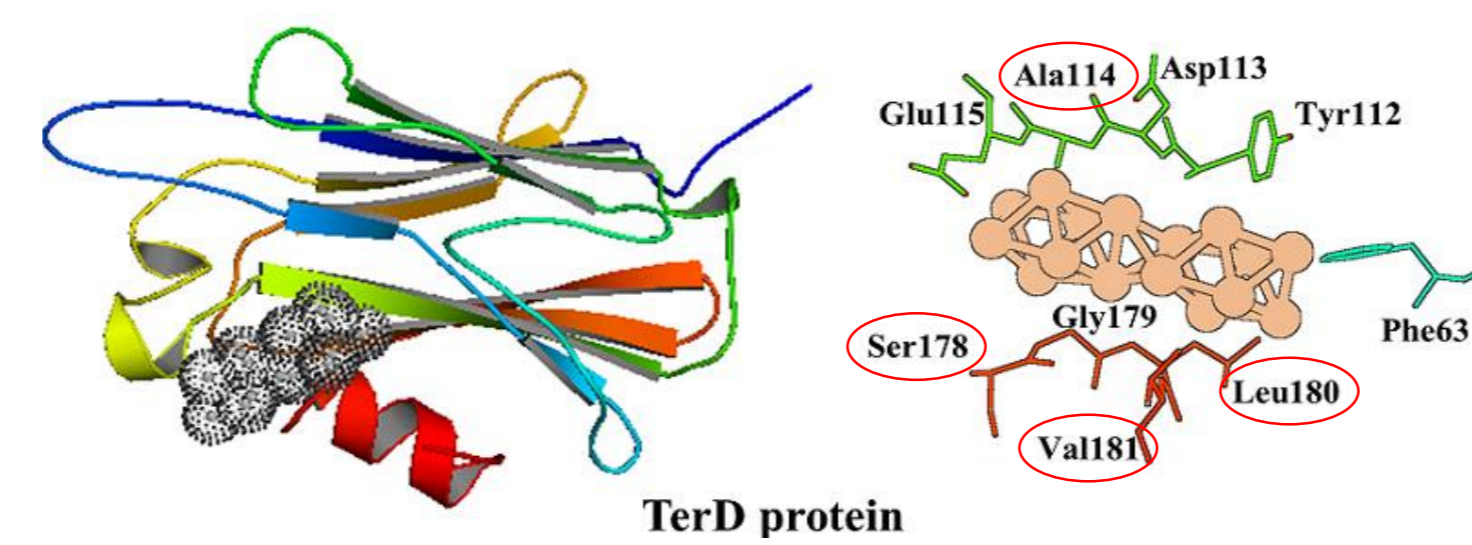
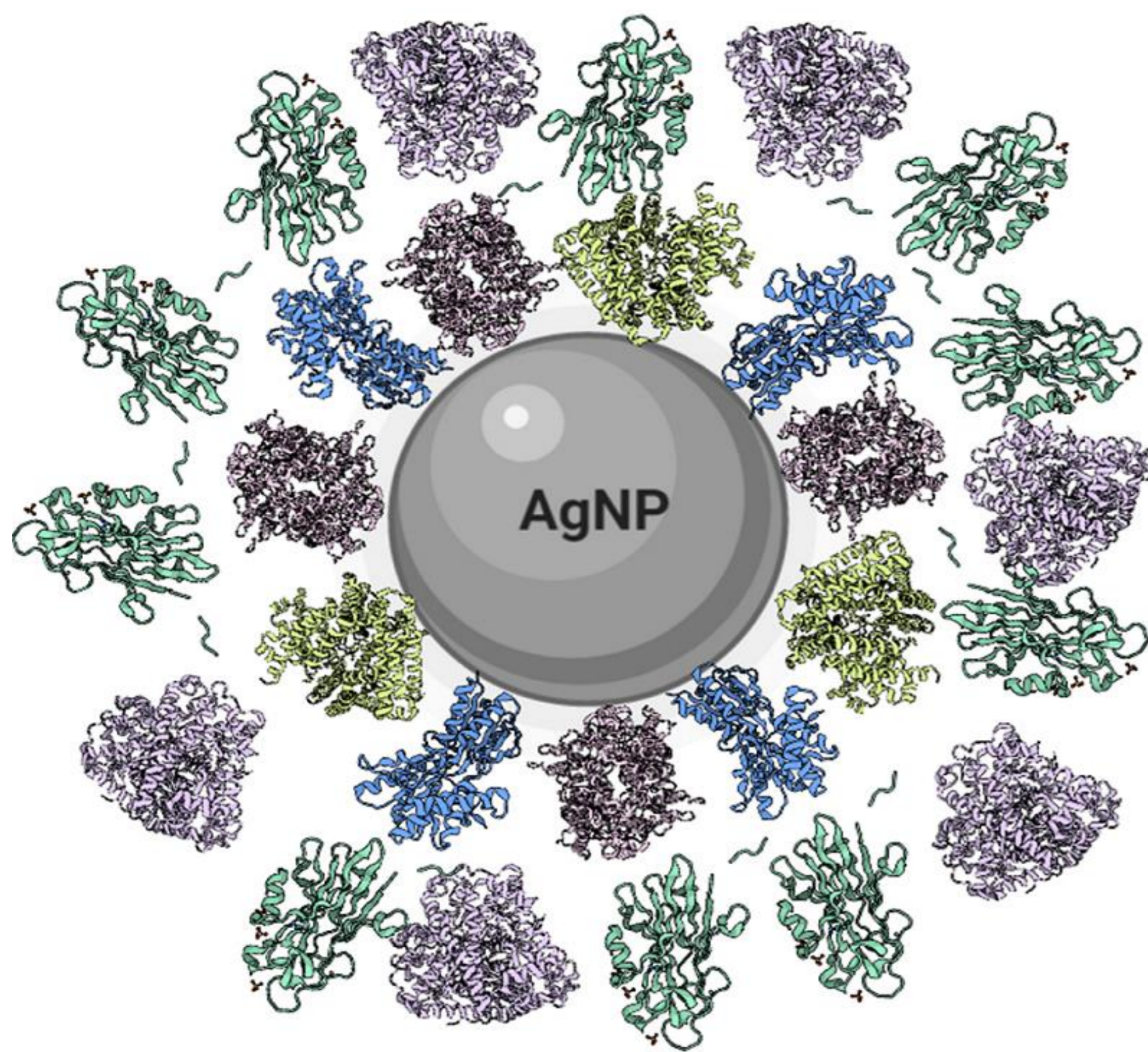
46 51 56 61 66 71 76 81 86 91 96 101
 IYVPLGCRDQSDIYHYVYDQKQKKEFDYKFDIETEGEADADKQORLSSLRKQGYNP
 IAYDIGGKGDQSFNDAAYAGLQKAAKFDYKTDIETGETDADK
 106 111 116 121 126 131 136 141 146 151 156 161
 VLVGFGYGFAPMEAVAKKYPKTTFGIVDSVVEGENVASLVFAEQEA
 VIGVGFAYGPAMEAVAKKYPKTTFGIVDSVVEGENVASLVFAEQEA
 166 171 176 181 186 191 196 201 206 211 216 221
 NTVGFGVGVDPPLIHKFEAGYKQGVQDTPKVKVLSQYLTQTAEEG
 226 231 236 241 246 251 256 261 266 271 276 281
 QIEKGSVVEYAAAGLSGQGVIEAASKAKVVAIGVDSQYKQAALA
 QIEKGSVVEYAAAGLSGQGVIEAASKAKVVAIGVDSQYKQAALA
 286 291 296 301 306 311 316 321 326 331 336 341 346
 GAVFTLAKSVHDEPLTGTQFDLKVVDGVLSDSNPEFAKIPGLAEAVDK
 AKEGIIDGTTKVKT

Docking molecular con Gaussian + Autodock



Resultados

Esquema de una hipótesis sobre la formación de la corona proteica y el intercambio de proteínas adsorbidas en la AgNP de *Streptomyces* sp. M7



Ki (mM)	ΔG Energía de unión	% Homología
343.11	-0.63	82.2
176.72	-1.03	95
506.39	-0.4	56.8
207.21	-0.93	63.22
172.18	-1.04	32.55

Interacciones entre los residuos de aminoácidos y la superficie de la AgNP

Referencias

- Grasso, G., *Nanomat. Switzerland*, 2020, 10, 2–20.
- Tugarova, A.V., *Talanta. Netherlands*, 2017, 174, 539–547

-Aminopeptidasa y ABC transporter presentan mayor afinidad con la superficie de la AgNP.

-Los residuos con cargas positivas como arginina y cargas negativas, como aspártico, interactúan con la superficie de la NP.

-Las demás proteínas interactúan mediante interacciones hidrofóbicas con residuos tales como Ser, Leu, Val, Ala

-La menor interacción se dio con la superóxido dismutasa, donde solo se observan residuos hidrofóbicos en el sitio de unión con la NP.

-Hay una fuerte interacción con aquellas proteínas que tienen mayor porcentaje de α-hélices, como Aminopeptidasa y el transportador ABC, mientras que se une menos efectivamente con las laminas β.