

Interacción de α -lactoalbúmina con cadenas de polielectrolito de diversa naturaleza: un estudio mediante simulaciones computacionales.



Paola B. Torres^{1,2}, Sofia Baldor³, Evelina Quiroga⁴, Antonio. J. Ramirez-Pastor⁴, Valeria Boeris³, Claudio. F. Narambuena^{1,2}

¹Facultad Regional San Rafael, Universidad Tecnológica Nacional, Av. Justo José de Urquiza 314, San Rafael Mendoza

²Grupo de Bionanotecnología y Sistemas Complejos, CONICET-UTN-UNSL, Av. Justo José de Urquiza 314, San Rafael Mendoza

³Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, CONICET, Suipacha 531, Rosario, Santa Fe.

⁴Instituto de Física Aplicada., CONICET, Universidad Nacional de San Luis. Chacabuco 917, San Luis.

Mail: paotorres89@gmail.com

Introducción

- Las proteínas del suero lácteo (PSL) son de gran importancia como ingredientes en la industria alimenticia debido a sus propiedades funcionales. Las dos principales PSL son α -lactoalbúmina (LAC) y β -lactoglobulina (BLG).
- La purificación de estas proteínas mediante un método simple, fácil y económico puede ser realizada mediante el uso de polielectrolitos (PE). Los PE tienen la capacidad de coacervar proteínas. La interacción electrostática juega un rol clave, depende de las condiciones de pH y concentración de sal.
- El objetivo de este trabajo es el estudio de la interacción entre una molécula de α -lactoalbúmina y una cadena de polielectrolito fuerte a tres concentraciones de sal.

Modelo Computacional

Titulación método de Monte Carlo

- Un grupo titulable es elegido aleatoriamente.
- Si esta desprotonado, la carga se mueve de la solución al grupo (proceso de protonación)
- Si esta protonado, el proton se mueve del grupo a la solución (proceso de desprotonación).
- Los movimientos son aceptados acorde a la siguiente probabilidad:

$$\min(1, e^{-\beta\Delta U_{el} \pm (pH - pK_a) \ln 10})$$

	ASP	GLU	CYS	TYR	C-ter	ARG	HIS	LYS	N-ter
pK_a	4.0	4.4	9.5	9.6	3.8	12.0	6.3	10.4	7.5
#	13	7	0	4	1	1	3	12	1

Esferas Rojas
Esferas Azules

Modelo de Grano Grueso

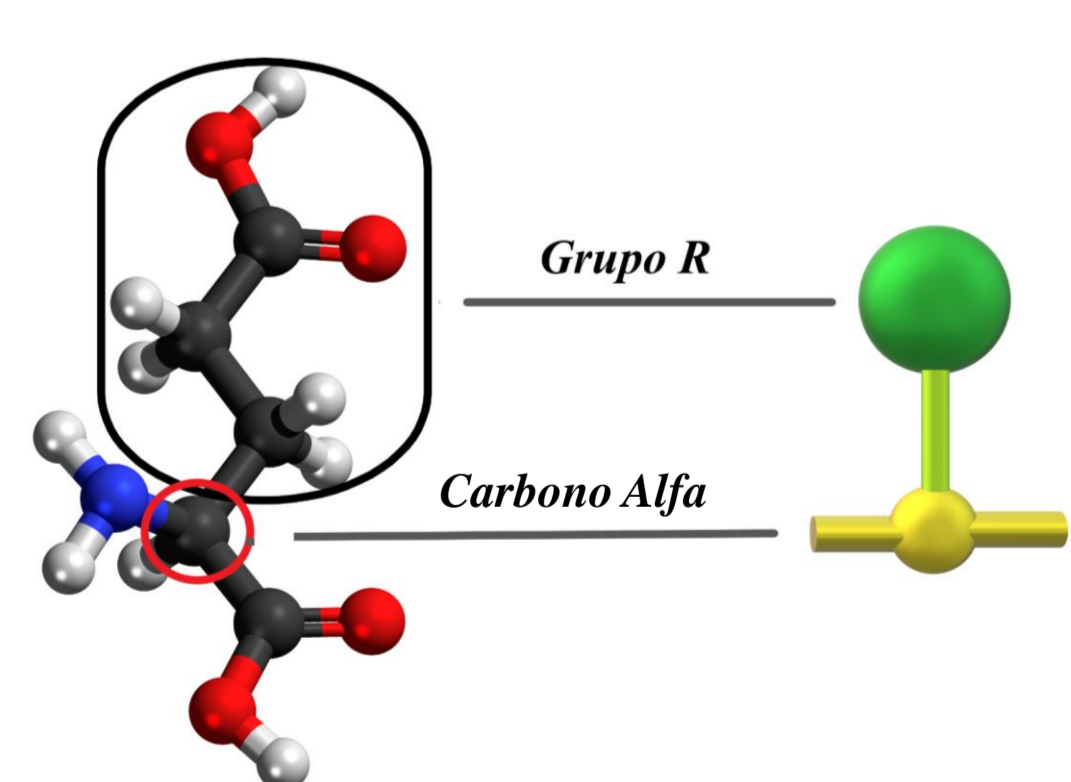
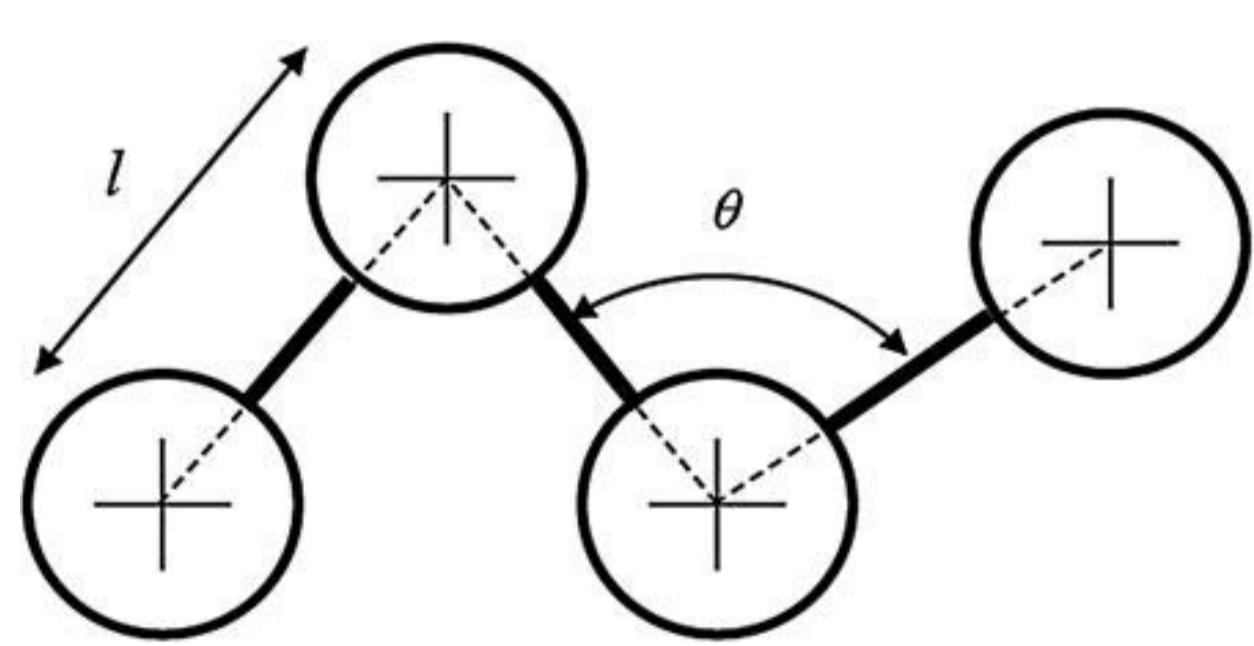


Figura 1. Modelo de grano grueso para el Polielectrolito.

Figura 2. Modelo de grano grueso para la proteína

En todas las simulaciones se trabajó con:

- Electrolitos 1:1
- Concentración de sal c_{sal} : 1mM, 10 mM y 100 mM
- Polielectrolito con 40 monómeros y separación $l_0 = 0,25nm$

Resultados

α -lactoalbúmina aislada

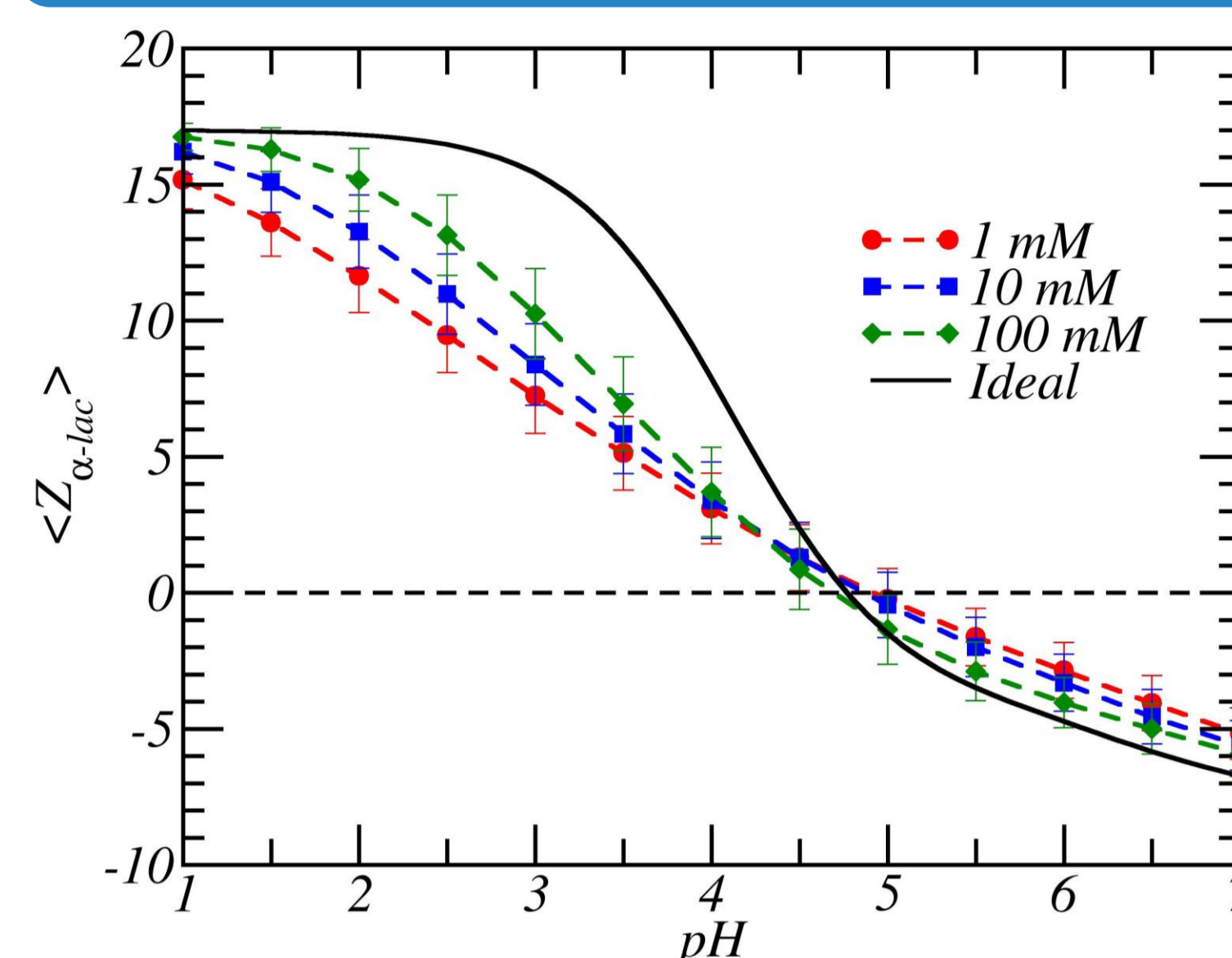


Figura 3. Carga neta de α -lactoalbúmina como una función del pH de la solución.

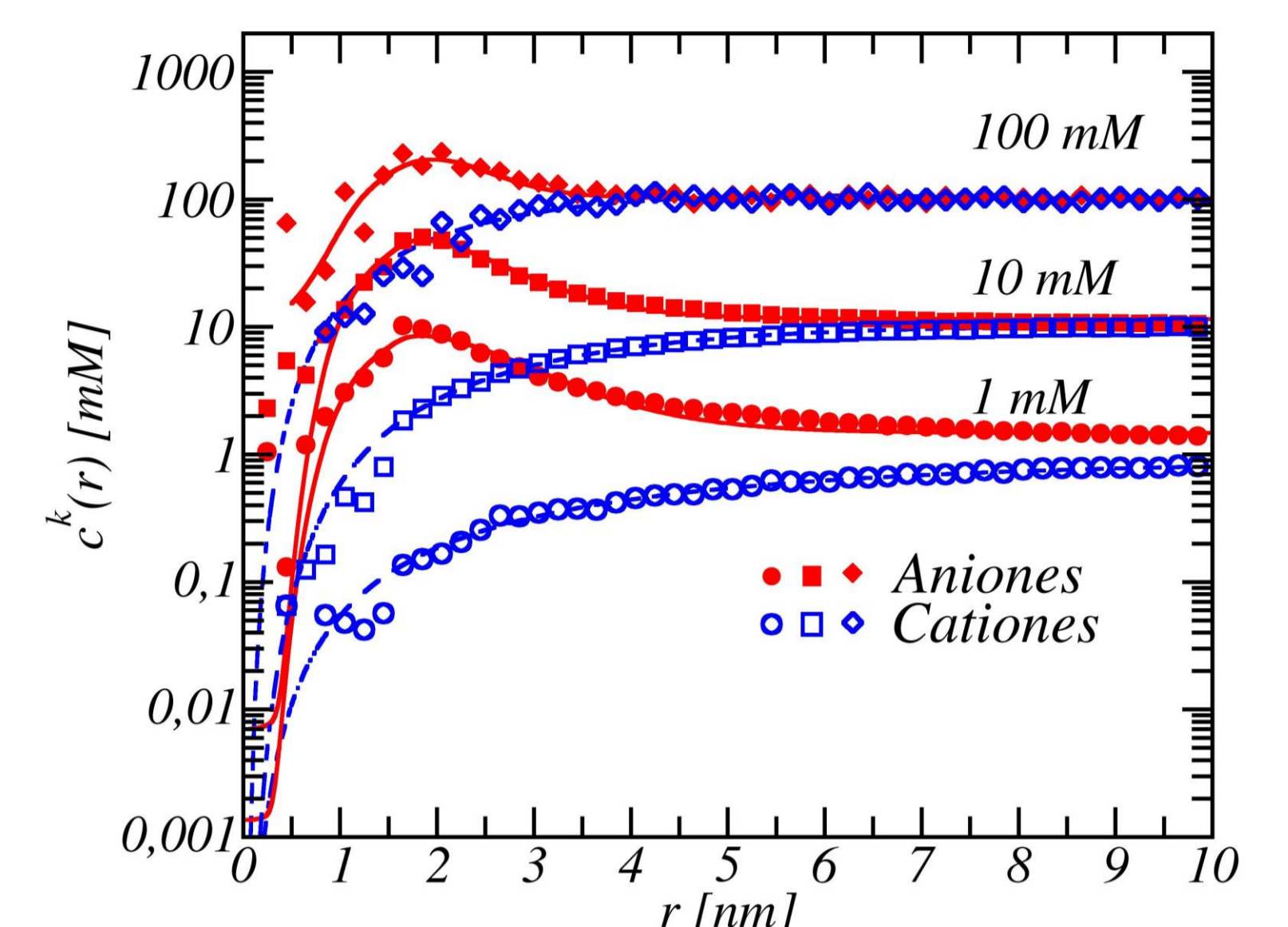


Figura 4. Concentración radial de iones pequeños $c^k(r)$ como una función de la distancia r al centro de masa de la proteína.

Interacción de α -lactoalbúmina y un PE aniónico fuerte

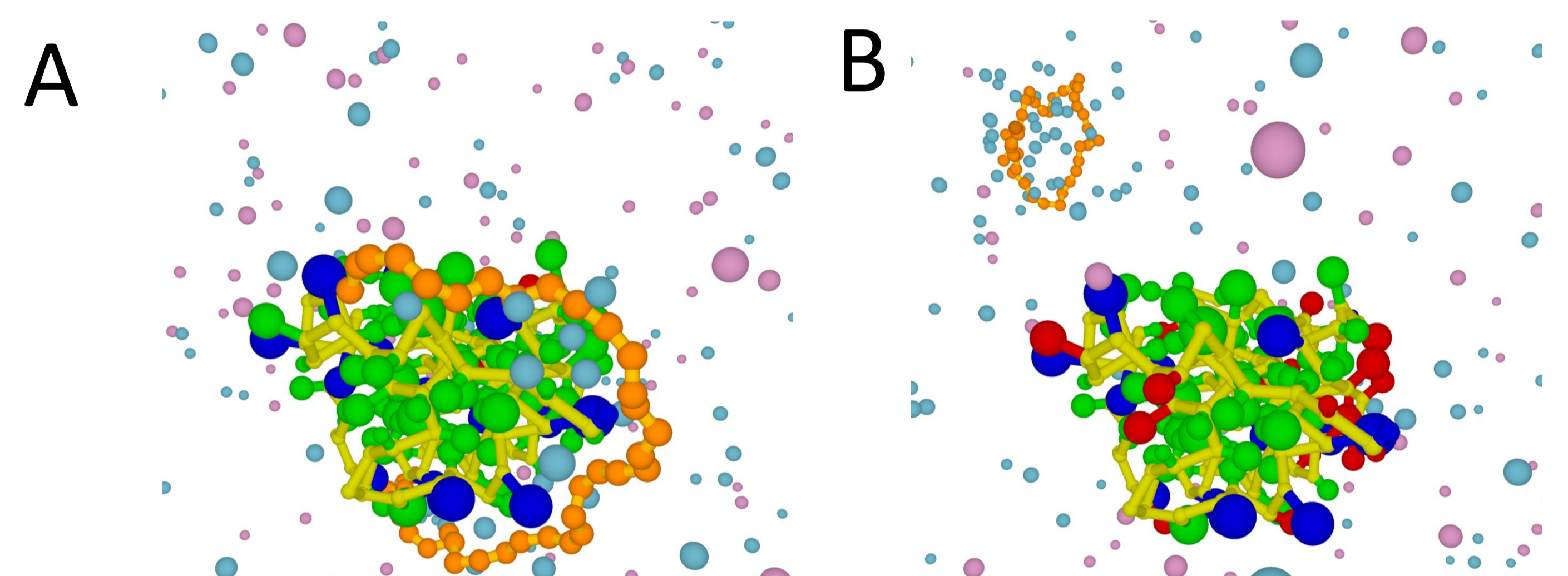


Figura 5. Capturas de la simulación de Monte Carlo para (A) pH = 3,0 y (B) pH = 6,0. El polielectrolito es representado como esferas naranjas. Los iones pequeños en: rosado (aniones) y celeste (cationes).

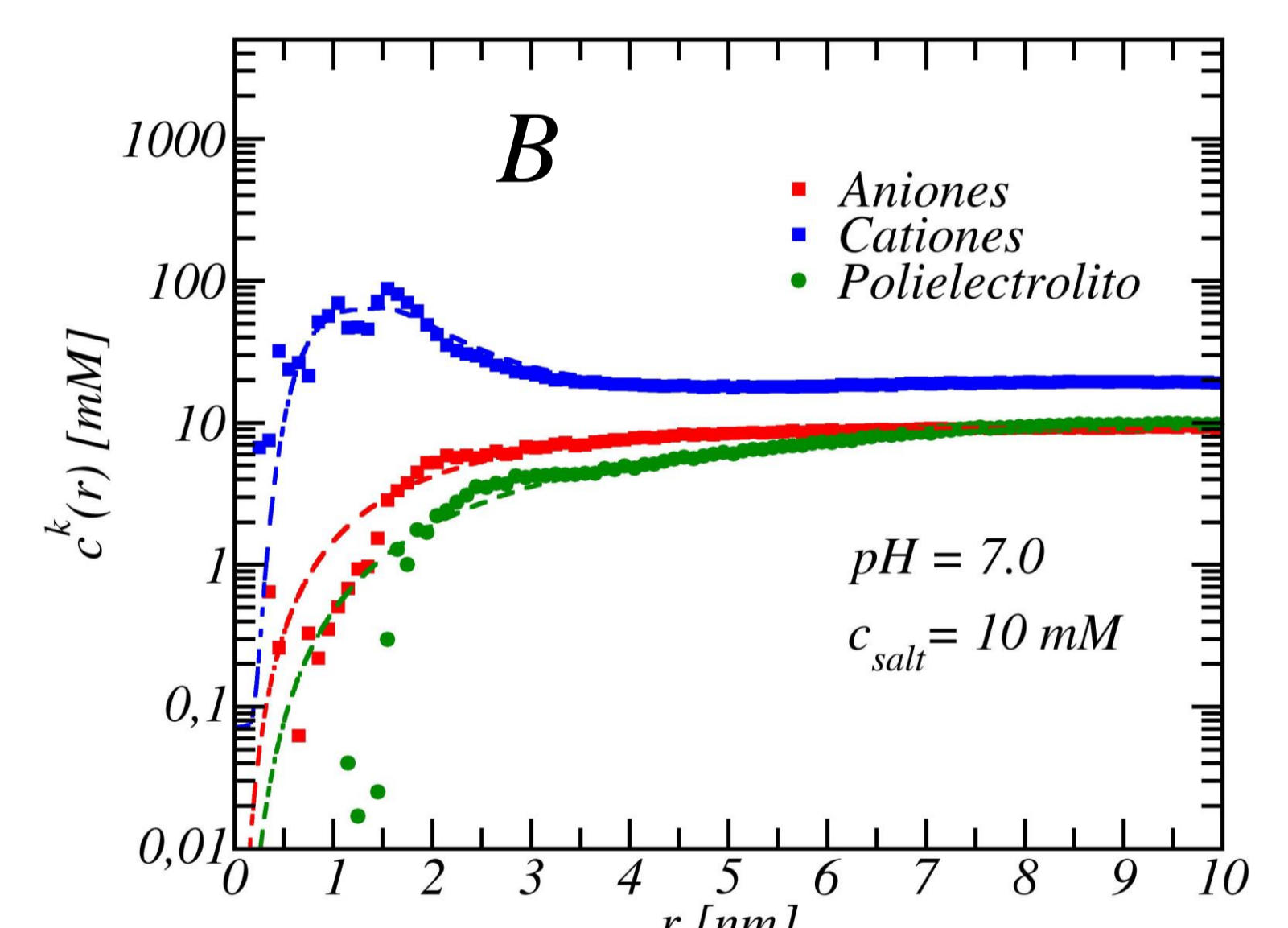
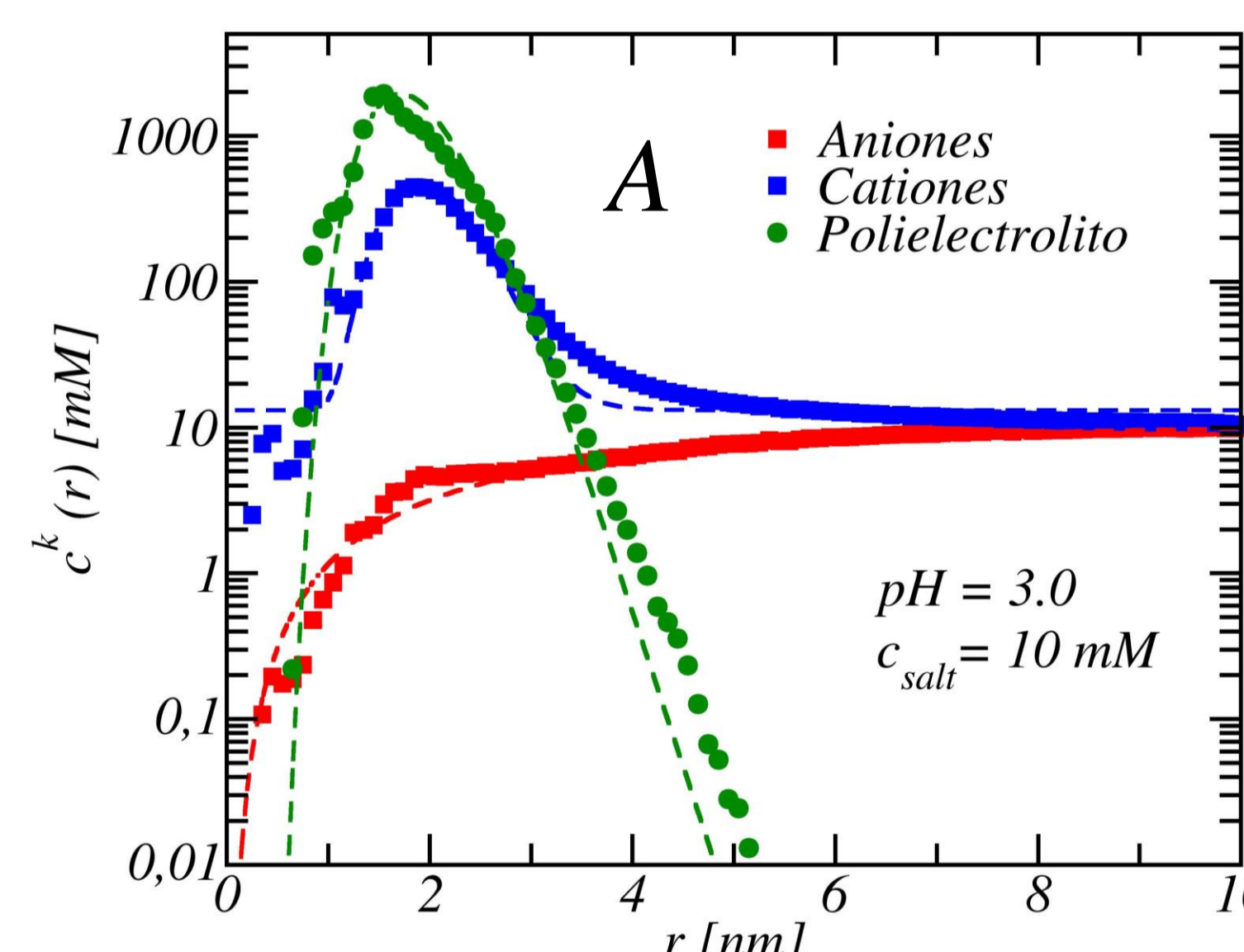


Figura 6. Concentración radial $c^k(r)$ para la interacción entre α -lactoalbúmina y un polielectrolito como una función de la distancia r a una concentración de sal $c_{salt} = 10mM$ para: A) pH=3,0 y B) pH = 7,0. Se agregaron líneas de trazo en cada curva para ayudar a guiar la vista

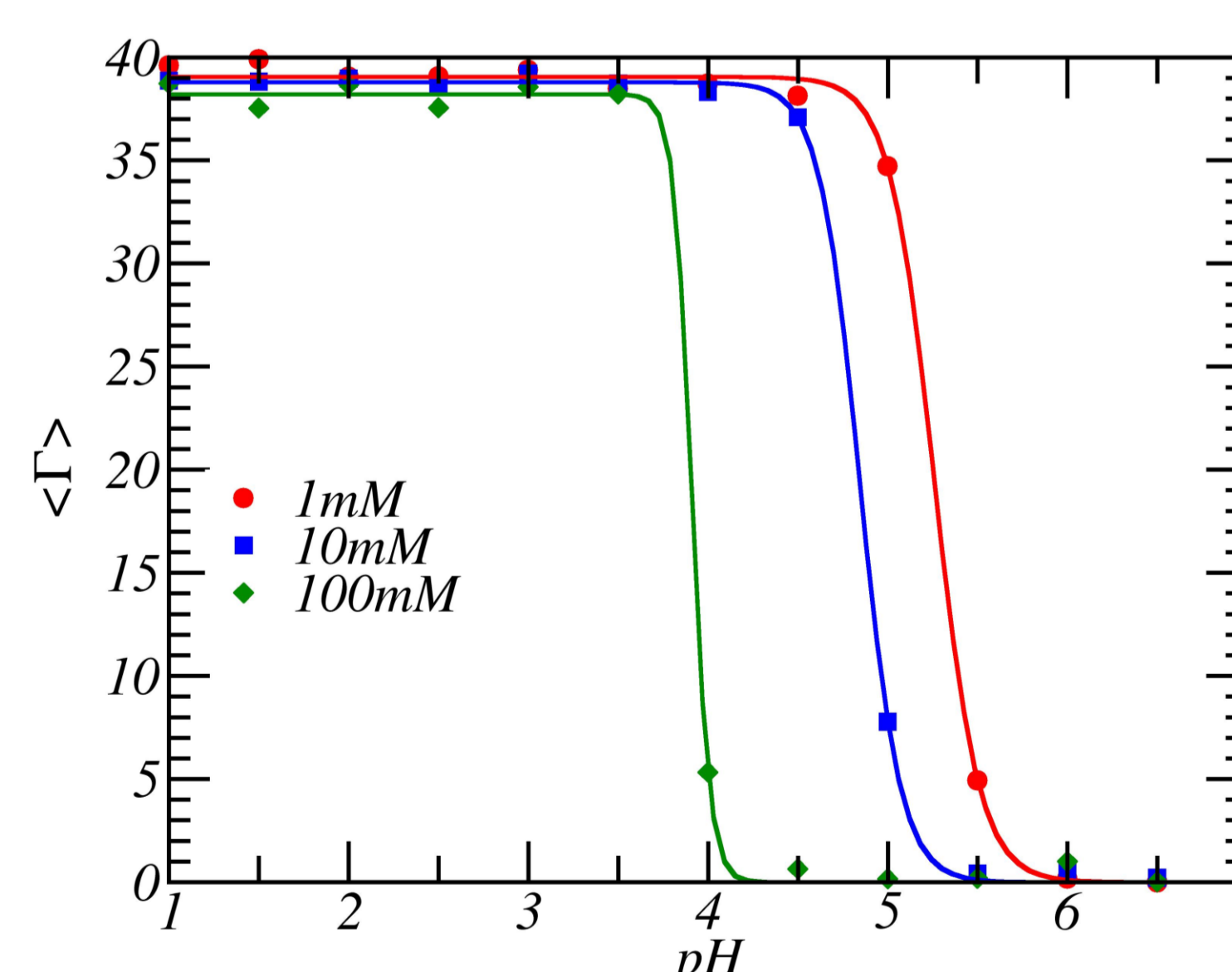


Figura 7. Adsorción del polielectrolito en la proteína como una función del pH, para $r < 3nm$.

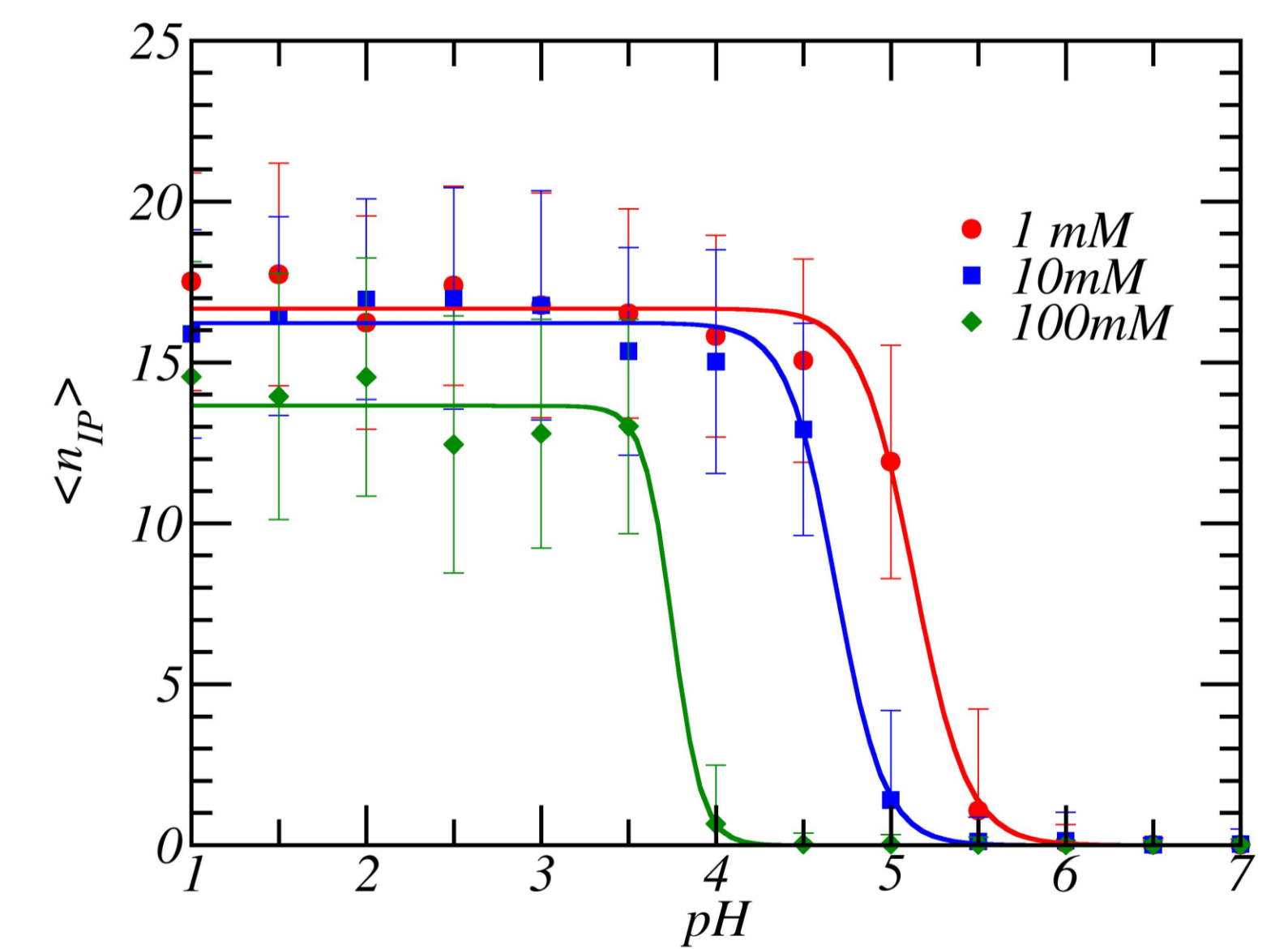


Figura 8. Pares iónicos formados como una función del pH para tres valores de c_{sal} .

Conclusión

- Se estudio la interacción entre α -lactoalbúmina y una cadena de polielectrolito aniónico aplicando el método de Monte Carlo.
- El polianión fue adsorbido en la proteína en un rango de pH inferior al punto isoeléctrico, es decir donde ambos tienen carga opuesta.
- El incremento de la concentración de sal reduce la cantidad de monómeros de PE adsorbidos en la proteína.

Referencias

- da Silva, F. L. B.; Jonsson, B. Soft Matter 2009, 5, 2862.
- da Silva, F. L. B.; Lund, M.; Jönsson, B.; Åkesson, T. The Journal of Physical Chemistry B 2006, 110, 4459.
- Torres P., Bojanich L., Sanchez-Varretti F.O., Ramirez-Pastor J.A., Quiroga E., Boeris V., Narambuena C.F. Colloids and Surfaces B: Biointerfaces 160 (2017) 161-168.
- Torres P.B., Quiroga E., Ramirez-Pastor J.A., Boeris V., Narambuena C.F. J.Phys. Chem B 2019. DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b03276