

## DESCRIPCIÓN MICROSCÓPICA DE LA DESNATURALIZACIÓN EN FRÍO DE PROTEÍNAS GLOBULARES

Espinosa Silva Yanis Ricardo

Grigera Raúl (Dir.), Carlevaro Manuel (Codir.)

Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLySiB), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP – CONICET.

[yanisrespinosa@gmail.com](mailto:yanisrespinosa@gmail.com)

**PALABRAS CLAVE:** Desnaturalización en frío, Efecto hidrofóbico, Proteína globular.

La desnaturalización en frío de las proteínas globulares es un fenómeno intrigante que merece especial atención. Asimismo, el efecto hidrofóbico es considerado la principal fuerza impulsora del plegamiento y la estabilidad proteica, así como la responsable de la pérdida de estabilidad conformacional en la proteína cuando esta es enfriada. La evidencia experimental y teórica reconoce el rol que desempeña la densidad del agua en dependencia con la temperatura, ya que está en gran medida determinada por las características energéticas y geométricas de los enlaces de hidrógeno. Por lo tanto, hay quienes argumentan que el modelo propuesto por Frank y Evans en 1945 confirma que los enlaces de hidrógeno en la capa de hidratación de solutos no polares (Shell) son más fuertes y ordenados en relación a las aguas alejadas de esta región (bulk) una vez ocurre la desnaturalización en frío. Sin embargo, el modelo de Muller y algunos datos experimentales indican que la capa de hidratación está más desordenada o rota, que las del agua bulk. Por lo tanto, existe una discrepancia en el modelo microscópico para la desnaturalización en frío. Con la intención de comprender este fenómeno, hemos elegido como

enfoque alternativo las simulaciones en dinámica molecular (DM) utilizando el paquete Gromacs-2018 y analizando la desnaturalización en frío de la frataxina Yfh1 de *S. cerevisiae*. En este estudio, creamos dos sistemas a 225 K y 1 bar. Para el primer sistema, la proteína se sumergió en la caja con agua en estado líquido que contenía una semilla de hielo Ih en estado sólido. Mientras tanto, el segundo sistema se hidrató agregando moléculas de agua al azar en estado netamente líquido. Después de 1  $\mu$ s de simulación, el primer sistema se cristalizó totalmente en hielo Ih (congelación), mientras que el segundo sistema (sin semilla) permaneció en estado líquido. Nuestras simulaciones por MD muestran detalles de la cantidad de enlaces de hidrógeno en la capa de hidratación y la reorganización de estos en los pares interactuantes agua-agua y agua-proteína durante el enfriamiento. Mostrando además, una disminución en la densidad del agua debido a un aumento en la fracción de moléculas de agua con una perfecta coordinación tetraédrica que modifican el área superficial en la proteína accesible al solvente en dependencia con el efecto hidrofóbico.

## APLICACIÓN MOMENTO DISCRETA Y SUS PROPIEDADES DE EQUIVARIANZA

Eyrea Irazú María Emma

Zuccalli Marcela (Dir.), Colombo Leonardo Jesus (Codir.)

Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.

[maemmaeyrea@hotmail.com](mailto:maemmaeyrea@hotmail.com)

**PALABRAS CLAVE:** Mecánica Geométrica, Mecánica discreta, Aplicación Momento.

La mecánica geométrica es un área de investigación en la que se utilizan distintas teorías y técnicas de distintas ramas de la matemática para tratar distintos sistemas físicos. Uno de sus principales intereses es el estudio de la dinámica de sistemas mecánicos (ya sea en su formulación Hamiltoniana como Lagrangiana) utilizando diversas técnicas de geometría diferencial. Por ejemplo, es usual identificar cantidades conservadas de los sistemas y luego utilizarlas para reducir sus grados de libertad. En el caso de los sistemas Hamiltonianos con simetrías, algunas de estas cantidades conservadas se pueden caracterizar en término de la llamada "aplicación momento". Una propiedad importante de esta aplicación es la "equivarianza" que permite, entre otras cosas, eliminar la

simetría del sistema aplicando el bien conocido teorema de reducción simpléctica de Marsden Weinstein.

En los últimos años, la mecánica geométrica abordó el estudio de sistemas mecánicos discretos; esto es, sistemas mecánicos con variable temporal discreta. Una de las principales aplicaciones de la mecánica discreta es la construcción de integradores de las ecuaciones de movimiento del sistema que gozan de buenas propiedades como la conservación del momento y la energía del sistema.

En este poster expondremos algunos resultados sobre las aplicaciones momento discretas y sus propiedades de equivarianza para sistemas Lagrangianos discretos.