

## ESTUDIO DE LA OCURRENCIA DE PÉPTIDOS BIOACTIVOS EN PROTEÍNAS DE SECUENCIA CONOCIDA MEDIANTE MÉTODOS BIOINFORMÁTICOS

Nardo Agustina

Añón María Cristina (Dir.), Parisi Gustavo (Codir.)

Centro de Investigación y Desarrollo en Criotecnología de Alimentos (CIDCA), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP –CONICET-CIC.

[aenardo@biol.unlp.edu.ar](mailto:aenardo@biol.unlp.edu.ar)

**PALABRAS CLAVE:** Peptidos Bioactivos, Búsqueda Secuencial, Asignación de estructura.

Los péptidos bioactivos (PB) son secuencias cortas (3-20 residuos) que se encuentran encriptados en proteínas alimentarias y son capaces, al ser ingeridos, de modular la actividad biológica de diferentes enzimas humanas desempeñando papeles clave en diferentes metabolismos tales como la regulación de la presión sanguínea, estimulando o suprimiendo la acción del sistema inmunológico, modulando la actividad del sistema nervioso entre otros. Si bien es aceptado que cualquier proteína puede ser fuente de péptidos bioactivos, aun no se ha indagado en las características globales de las proteínas que los contienen y si es que existe alguna relación estructural y secuencial entre las mismas. Se seleccionaron de la base de datos BIOPEP 1.679 péptidos con longitudes mayores a 5 residuos para realizar la búsqueda de ocurrencias exactas en proteínas de secuencia conocida utilizando la base de datos no redundante de NCBI. De esta forma se identificaron 88.909 secuencias con longitudes que abarcan desde 6 a 13.256 residuos que presentaron de 1 a 65 ocurrencias exactas de al menos un PB en su secuencia. Con el objeto de caracterizar las secuencias que contienen al menos un péptido y estudiar si existe correlación entre la estructura, tipo de plegamiento o superfamilia estructural y la ocurrencia y actividad del PB se realizó la asignación de dominios estructurales mediante búsquedas de similitud secuencial con el algoritmo BLAST contra la base de datos de dominios estructurales de CATH. Se asignó estructura a 58.167 secuencias (72,2 % de la cantidad inicial). Las secuencias a las cuales fue posible asignar estructura se agruparon en 333 superfamilias de dominios según CATH de las cuales solo cuatro plegamientos agrupan el 87,54 % de las secuencias.



Se estudió la distribución de los distintos tipos de PBs por superfamilia estructural, encontrándose que, las distintas superfamilias pueden tener varios PBs iguales o con distintas propiedades biológicas. El total de superfamilias fue dividido en dos, considerando arbitrariamente el número de 5 ocurrencias de PBs como límite. Con el objetivo de indagar si las proteínas con más de 5 PBs tienen alguna particularidad funcional, se analizó las distribuciones del número de términos GO (Gene Ontology) asociados a cada superfamilia, que describen la función molecular, el proceso biológico en donde participa la proteína y el componente celular al que pertenece. Encontramos que las superfamilias con más de 5 PBs son secuencialmente y estructuralmente más diversas que el grupo con menor número de PB y, además, son secuencialmente y estructuralmente más diversas que todas las superfamilias de CATH tengan o no PBs. Estos resultados son promisorios para desarrollar herramientas bioinformáticas para identificar nuevas posibles proteínas conteniendo PBs basándose en características globales de la proteína y no en el conocimiento previo de PBs ya caracterizados y depositados en bases de datos.

## TRANSESTERIFICACIÓN CATALÍTICA DE ACEITE DE RICINO CON BUTANOL

Navas Marisa Belén

Mónica Laura Casella (Dir.)

Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas (CINDECA), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP –CONICET-CIC.

[marisanavas@quimica.unlp.edu.ar](mailto:marisanavas@quimica.unlp.edu.ar)

**PALABRAS CLAVE:** Biodiesel, Catálisis, Catalizadores Heterogéneos.

Con el fin de estudiar la reacción de transesterificación de aceite de ricino con butanol, se prepararon catalizadores de MgO y ZnO soportados en  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, y mezclas de ambos óxidos en proporciones 0.25, 0.5, 1 y 5 Zn/Mg. Los mismos fueron caracterizados empleando difracción de rayos X, fisiorción de N<sub>2</sub> y microscopía de barrido electrónico. Los resultados

fueron acordes en todos los casos a sólidos mesoporosos con alta superficie específica, exhibiendo la fase cristalina óxido. Se obtuvieron en todos los casos conversiones

