

Innovaciencia 2015; 3 (1) sup 1: 5

MODELADO MOLECULAR DE REACCIONES ENZIMÁTICAS

Andrés M. Escorcía^{1,2}

Cómo citar este resumen: Escorcía AM. Modelado molecular de reacciones enzimáticas. Innovaciencia facultad cienc. exactas fis. naturales. 2015; 3(1) sup 1: 5

Artículo recibido el 04 de mayo de 2015 y aceptado para publicación el 16 junio de 2015

RESUMEN

Las enzimas son macromoléculas de origen biológico que actúan como catalizadores de las reacciones químicas responsables de la funcionalidad de los seres vivos. Así, las enzimas intervienen en diferentes procesos biológicos, tales como la digestión de alimentos, la transmisión de impulsos nerviosos, la fecundación, entre otros. Por otro lado, las enzimas pueden ejercer su poder catalítico aún por fuera de los organismos vivos (i.e. se pueden aislar y utilizar en un medio de reacción diferente al del organismo del que provienen). Una característica importante de las reacciones enzimáticas es que pueden ocurrir bajo condiciones de reacción suave (e.g. temperatura y pH moderados), lo que ha hecho a las enzimas atractivas para el desarrollo de procesos biotecnológicos amigables con el medio ambiente. De hecho, las enzimas han logrado constituirse hoy día como catalizadores valiosos en síntesis orgánica (e.g. en la síntesis de fármacos), ya que además son altamente selectivas y disminuyen el riesgo de obtener productos de reacción indeseados¹.

Por todo lo anterior, las enzimas son el objeto de estudio de numerosas investigaciones a nivel mundial. Las investigaciones con enzimas abarcan desde los experimentos hasta los estudios *in silico*. La ventaja de estos últimos es que brindan información a nivel molecular a la cual no es posible acceder experimentalmente. El estudio *in silico* (o modelado molecular) de una reacción enzimática permite

comprender claramente cuáles son las bases moleculares responsables de las propiedades catalíticas (especificidad, selectividad, estabilidad, etc) que puede exhibir una enzima al catalizar una reacción determinada^{2,3}. Obtener este tipo de información resulta bastante útil en diferentes campos de investigación, como por ejemplo, en el diseño racional de fármacos, insecticidas, enzimas (mutantes), entre otros^{4,5,6}.

El modelado molecular de reacciones enzimáticas es un campo que ha sido muy poco explorado en Colombia pero que ha ganado gran atención en los últimos años^{2,3}.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Ghanem A., Aboul-Enein HY. Tetrahedron: Asymmetry. 2004. 5:3331-51.
2. Escorcía AM, Molina D, Daza MC, Doerr M, J. Mol. Catal. B: Enzym. 2013. 98:21-9.
3. Escorcía AM, Daza MC, Doerr M. J. Mol. Catal. B: Enzym. 2014. 108:21-31.
4. Liu D, Trodler P, Eiben S, Koschorreck K, Müller M, et al., Chem Bio Chem 2010. 11:789-95.
5. Alonso H, Bliznyuk AA, Gready JE, Med. Res. Rev. 2006. 26:531-568.
6. Ramalho TC, França TCC, Rennó MN, Guimarães AP. Chem.-Biol. Interact. 2010. 187:436-40.

Palabras clave: Enzimas, selectividad, modelado molecular, diseño racional.

1. Grupo de Investigación en Biotecnología Agroambiental –MICROBIOTA–, Universidad de Santander, Bucaramanga, Colombia. Correspondencia: andrescorcia6@hotmail.com

2. Grupo de Bioquímica Teórica, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga. Colombia.